

III

Jaakko Paasivirta ja Pirjo Mikkelsen

Happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia

Vaihe II. Orgaanisten yhdisteiden kemiallinen karakterisointi ja korrelaatiot



Jaakko Paasivirta ja Pirjo Mikkelsen

Happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia

Vaihe II. Orgaanisten yhdisteiden kemiallinen karakterisointi ja korrelaatiot

ISBN 952-11-0244-6
ISSN 1455-0792

Painopaikka: Oy Edita Ab
Helsinki 1997

SISÄLLYS

	TIIVISTELMÄ.....	5
	ENGLISH SUMMARY.....	7
1.	TUTKIMUKSEN TAUSTA JA TAVOITTEET.....	9
2.	KEMIALLINEN KARAKTERISOINTI.....	10
2.1	Tutkitut vesinäytteet.....	10
2.2	Näytteiden käsittely.....	10
2.2.1	Yleiskuvaus.....	10
2.2.2	Neutraaliaineet.....	11
2.2.3	Heikot hapot.....	12
2.2.4	Vahvat hapot.....	13
2.3	GC/MS analyysit.....	15
2.4	Tulokset	16
3.	TILASTOTARKASTELU.....	19
3.1	Käytetyt menetelmät.....	19
3.2	Yhdisteryhmien vaihtelu näytteissä.....	20
3.3	Vertailu vaikutuksiin Pearson-korrelaatioilla.....	21
3.3.1	Akuutit myrkkyyvaikutukset.....	21
3.3.2	Krooniset vaikutukset kaloihin.....	25
3.3.3	Sinisimpukan kasvu ja kolmipiikin rakennemuuttajat.....	30
3.3.4	Sedimentin eliöiden biomassa.....	33
3.3.6	Rakkolevän eliöyhteisön biomassa.....	37
3.4	Suo- ja kuntavesien tilastotuloksista.....	41
4.	POHDINTA JA JOHTOPÄÄTÖKSET.....	41
5.	KIRJALLISUUSLUETTELO.....	42
	LIITE 1. Kemiallinen karakterisointi	43

TIIVISTELMÄ

Orgaaniset yhdisteet analysoitiin mäntysellun valmistuksen kokonaisjätevesistä ennen ja jälkeen aktiivilietekäsittelyn. Sellun delignifikaatio- ja valkaisuolosuhteet oli tehty TCF- tai ECF-menetelmällä. Samat määritykset tehtiin kuorimojätevedestä, suovedestä ja kunnallisen jätevesipuhdistamon käsitellystä jätevedestä.

Kaikista seitsemästä vesinäytteestä eristettiin neljä erilaista jaetta. Kunkin jakeen valmistus aloitettiin pH-säädöllä ja sisäisen standardiaineen (ISTD) lisäyksellä. Neutraaliainejakeen (N) uutaminen tehtiin pH 11:ssä heksaanilla. Heikkojen happojen analyysia varten uutettiin pH 6.5-7.0:ssä heksaanilla ns. anisolia (AN), minkä jälkeen vesiliuos käsiteltiin kaliumkarbonaatilla ja asetanhydridillä ja muodostuneet fenoliasetaatit uutettiin heksaanilla fenolijakeeksi (P). Vahvat hapot (AC) uutettiin t-butyylimetyylietterillä pH 8:ssä ja pH 5:ssä. Uute haihdutettiin kuiviin, liuotettiin asetoniin ja hapoista tehtiin PFB-esterit pentafluorobentsyylibromidilla kaliumkarbonaatin läsnäollessa. Kukin fraktio puhdistettiin nestekromatografialla silika- ja aluminapylväissä ja näyte injektioitiin HRGC/HRMS-laitteistoon. Orgaaniset yhdisteet tunnistettiin niiden kokonaismassaspektreistä vertaamalla tunnettujen vertailuaineiden spektreihin. Yhdisteet myös kvantitoitiin vertaamalla kokonaisioni-kromatogrammin (TIC) ainepiikin ja sisäisen standardin piikin pinta-aloja.

TCF- ja ECF-näytteistä tunnistettiin ja kvantitoitiin 323 yhdistettä. Useimmille saatiin tarkka rakenenne, muille rakennetyyppi. Vertailunäytteistä (KUORI, SUO ja KUNTA), kvantitoitiin vain ne yhdisteet, jotka olivat samoja kuin TCF- ja ECF-vesistä tunnistetut. Tunnistamattomiksi jäi 16 yhdistettä jakeessa P ja kolme jakeessa AN. Tunnistetut 323 ainetta jaettiin 22 kemialliseen ryhmään. TCF-vesissä vallitsivat alifaattiset karboksyylihapot, seuraavia ryhmiä, hartsihappoja ja hiilivetyjä, oli kertaluokkaa vähemmän. Käsittelemätön ECF-vesi sisälsi eniten hartsihappoja, seuraavaksi eniten alifaattisia karboksyylihappoja, hiilivetyjä ja fenoleja. Kuorimovedessä suurimmat ryhmät olivat alifaattiset karboksyylihapot ja fenolit. Suovedessä oli eniten tyydyttyneitä hiilivetyjä ja kunnallisessa jätevedessä alifaattisia karboksyylihappoja.

Akuutit myrkkyyvaikutukset sekä mesokosmoksessa mitatut krooniset kalatoksisuudet ja sedimentin biomassan kasvu pyrittiin selittämään

yhdisteryhmien ja yksittäisten yhdisteiden pitoisuuksien vaihtelulla tutkimusnäytteissä (TCF-, ECF-, SUO- ja KUNTA-vedet; mesokosmoksessa TCF- ja ECF-vedet kahtena laimennoksena). Alustavana tilastokäsittelynä tulostettiin kaksisuuntaiset Pearson-korrelaatiot.

Korrelaatioiden perusteella akuuttiin toksisuuteen vaikuttivat yhdisteryhmistä vain (käsitlemättömän TCF-veden) alifaattiset karboksyylihapot valobakteeritestin osalta merkitsevästi ja levänkasvutestissä jokseenkin merkitsevästi. Mesokosmosvaikutuksissa stimulaattoreita (merkitsevä positiivinen korrelaatio) näyttivät olevan aromaattiset hapot kirjolohen veriarvoille HB ja MCHC sekä sedimentin *Macoman* kasvulle, ftalaatit kirjolohen veriarvoille HB ja HCT sekä rikkiyhdisteet sedimentin *Lymnean* kasvulle. Merkitsevä negatiivinen korrelaatio (inhibitio) havaittiin ketoneilla ja tyydyttyneillä hiilivedyillä kirjolohen maksaentsyymien UDP tasolle.

Yksittäisten aineiden merkitseviä korrelaatioita akuuttitoksisuudelle havaittiin viidellä tyydyttyneellä hiilivedyllä, voihapolla ja dekaanihapolla levänkasvun estoon, kolmella tyydyttyneellä ja kuudella tyydyttymättömällä hiilivedyllä, kahdella rikkiyhdisteellä, kolmella ketonilla, neljällä aldehydillä, naftaleeniyhdisteellä, bentsoehappojohdoksella ja 19:lla alifaattisella karboksyylihapolla valobakteereille.

Kroonisiin kalavaikutuksiin korreloivat stimulantteina (+) kuusi yhdistettä veriarvoille HB ja HCT sekä inhibiittoreina (-) kolme ainetta maksan somaattiselle indeksille (LSI) ja 20 yhdistettä maksaentsyymien UDP tasolle.

Sedimentin eliöiden biomassan kasvua stimuloivat merkitsevien korrelaatioiden perusteella kahdeksan ainetta sinisimpukan, 15 *Lymnean*, kaksi *Dendrocoleumin* sekä 13 yhdistettä *Hydrobian* kasvua.

Rakkoleväyhteisön kasvussa havaittiin merkitseviä positiivisia (stimuloivia) korrelaatioita vain *Lymnealle* kolmella yhdisteellä. Merkitsevän negatiivisesta korreloivia aineita havaittiin kaksi *Mytilukselle*, kolme *Theodoxukselle*, pentaanihappo kokonaisbiomassalle ja 12 yhdistettä biomassan kasvulle rakkolevä mukaanluettuna.

Yhdisteiden keskinäiset korrelaatiot rajoittavat mahdollisuutta varmoihin johtopäätöksiin pelkkien Pearson-korrelaatioiden perusteella. Sen vuoksi kertyneen aineiston tilastokäsittelyä on jatkettu pääkomponenttianalyyseillä (PCA ja PC-regressio), jotka selostetaan eri raportissa. Tulosten perusteella voidaan valita jätevesien mahdollisten ekologisten vaikutusten kannalta mielenkiintoisimmat yhdisteet malliaineiksi, joilla tehdään lopullinen identifiointi ja kehitetään tarkka analytiikka. Malliaineita voidaan sitten käyttää ekotoksisuustutkimuksissa yksittäisillä yhdisteillä ja niiden kombinaatioilla sekä prosessien parantamisessa.

ENGLISH SUMMARY

Total wastewaters before and after activated sludge treatment from pine pulp manufacture with totally chlorine free (TCF; oxygen chemicals used) and elemental chlorine free (ECF; chlorine dioxide included) delignification and bleaching processes were analyzed for organic trace compounds. For comparison, wastewater from wood barking process of the mill, leachate water from moor and treated wastewater from municipal waste purification plant were studied similarly.

Four different fractions were isolated from each seven samples. Each procedure started with adjustment of pH and addition of internal standards for quantitation. Then, for neutral compound fraction (N; at pH 11), extraction was performed with hexane. Weak acids were first extracted with hexane (at pH 6.5-7.0) to collect the "anisole" fraction (AN). Then, water residue was treated with potassium carbonate and acetic acid anhydride to derivatize phenols which were then extracted in hexane as acetates ("phenol fraction" P). Strong acids (AC) were extracted with t-butyl methyl ether / dichloromethane 1:3 (v/v) from pH 5 and pH 8 solutions. AC fraction was dried, evaporated, dissolved in acetone and treated with potassium carbonate and pentafluorobenzyl bromide to make PFB derivatives of acids and phenols. Clean up of the four fractions was done with silica and alumina column liquid chromatography (LC). Then, they were injected to high performance gas chromatography / high resolution mass spectrometry (HRGC/HRMS). The organic trace compounds were identified from their total mass spectra comparing them with library spectra of known reference compounds. Quantitation was based on the areas of peaks in total ion current chromatogram (TIC) related to those of the internal standards.

Exact structure or structure type of 323 different compounds in the four TCF and ECF mill wastewater samples was identified. Only these compounds were considered from the three reference samples (barking, moor and municipality) in quantitative comparisons. Sixteen compounds (peaks in TIC) in fraction P and three in fraction AN remained unidentified, so far. The identified compounds could be classified in 22 functionally different substance groups. The most abundant compounds in TCF wastewater were aliphatic acids, but in ECF resin acids. Next important in TCF were resin acids and unsaturated hydrocarbons, in ECF aliphatic acids, unsaturated hydrocarbons and phenols. Two major compound groups in barking were aliphatic acids and phenols. In moor saturated hydrocarbons, and in municipal water aliphatic acids, were most abundant.

Statistical methods were performed for comparison of the contents of identified compounds with results of acute toxicity and mesocosms tests done with the same water samples (bark water, however, excluded). Pearson correlations between acute toxicities and compound groups indicated, that only aliphatic carboxylic acids were significantly toxic to light bacteria and nearly significantly toxic to algae growth. Compound group aromatic acids and phthalates correlated significantly positively (stimulated) chronic blood values of fish and sulfur compounds seemed to simulate the growth of sediment *Lymnea*. Negatively correlated groups (inhibitors) were ketones and saturated hydrocarbons to the fish liver enzyme UDP level.

Numerous individual compounds indicated stimulating (+) or inhibitory (-) effects as significant correlations to acute toxicities and to the effect values from mesocosms tests on chronic fish effects and on sediment and bladder wrack community biomasses. To eliminate interferences from intercorrelations of the substances, the statistical treatment was continued by principal component analyses (PCA and PC regression), which will be reported separately.

The statistical treatments applied to the biological effect and chemical constitution data together are useful in selecting the most probable ecologically effective substance. Then, authentic model compounds of these candidates can be bought or synthesized and used for verification of identity, measurements of exact concentrations and further tests of effects.

1. TUTKIMUKSEN TAUSTA JA TAVOITTEET

Tässä osaraportissa esitetty kemiallinen karakterisointitutkimus tehtiin Jyväskylän yliopiston kemian laitoksessa (JY) elokuun 1995 ja toukokuun 1996 välisenä aikana Suomen ympäristökeskuksen (SYKE) kanssa 7.7.1995 tehdyn sopimuksen mukaisesti. Tutkimus kuuluu ohjelman "happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia" vaiheeseen II osana D. Osat A, B ja C ovat ekotoksisuustutkimuksia. Tutkimustulosten tilastollinen käsittely tuli lisäyksenä ohjelmaan keväällä 1997: kahden kuukauden alustavasta tilastokäsittelystä tehtiin sopimus SYKE/JY 24.3.1997. Käytetyt, tässä työssä edelleen kehitetyt, menetelmät oli opittu kahdentoista TCF- ja ECF-prosessiveden kemiallista karakterisointia ja vertaamista viiteen mesokosmosefektiin koskevassa tutkimuksessa (Paasivirta ja Mikkelsen 1997).

Karakterisointitutkimuksessa analysoitiin sellun valkaisuun happikemikaaleja käyttävän tehtaan jätevesiä ja ns. vertailuvesiä. Näytteet fraktioitiin kemiallisesti ja puhdistetut fraktiot analysoitiin kaasukromatografialla käyttäen detektorina korkean erotuskyvyn massaspektrometria. Saatujen spektrien perusteella pyrittiin tunnistamaan nimenomaan valkaisussa syntyviä pienimolekyyllisiä orgaanisia yhdisteitä. Näytteiden totaali-ionivirtakromatogrammien (TIC) ja näytteisiin lisättyjen sisäisten standardiaineiden avulla laskettiin kaikille havaituille aineille suhteellinen pitoisuus. Nämä pitoisuudet suhtautuvat eri näytteiden välillä kuten todelliset pitoisuudet, mikä sallii näytteille mitattujen vaikutusten ja aineiden välisten yhteyksien tutkimisen tilastokäsittelyllä.

Vaikutusmittausten ja kemiallisen karakterisoinnin tilastollisena vertailuna tehtiin ensin tässä raportissa esitetyt kaksisuuntaiset Pearson korrelaatiot. Tilastokäsittelyä jatkettiin monimuuttuja-analyyseilla, jotka raportoidaan erikseen.

Tunnettujen aineiden todellisetkin pitoisuudet voidaan tuloksista määrittää malli- ja standardiaineiden vertailuajoilla saatavien responsisuhteiden perusteella. Mikäli vaikutuksiin liittyvästä yhdisteestä ei ole malliainetta, se voidaan syntetisoida rakennanalyysin varmistusta, kvantitointeja sekä vaikutustutkimuksia varten. Täydelliset tilastokäsittelyt, tulosten perusteella tehtävät malliainesynteetit sekä lopulliset kvantitoinnit eivät sisällyneet tähän tutkimusvaiheeseen.

2. KEMIALLINEN KARAKTERISOINTI

2.1 Tutkitut vesinäytteet

Tutkitut valkaisun kokonaisjätevedet olivat Wisaforest Oy:n sulfaattiselluloosatehtaalta Pietarsaaresta.

ECF-mäntymassan kokonaisjätevesi:

- 1) ECFO ennen käsittelyä
- 2) ECFB pilotti-aktiivilietelaitoksen jälkeen

TCF-mäntymassan kokonaisjätevesi:

- 3) TCFO ennen käsittelyä
- 4) TCFB pilotti-aktiivilietelaitoksen jälkeen

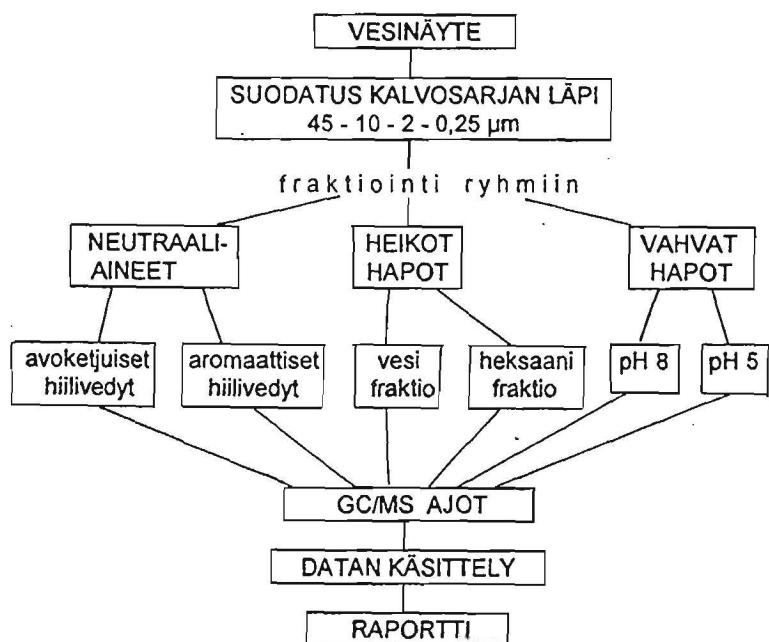
Vertailuvedet:

- 5) SUO, Oriveden Lakkasuon vesi
- 6) KUNTA, Rauman kaupungin puhdistettu jätevesi
- 7) KUORI, mäntykuorimon vesi

2.2 Näytteiden käsittely

2.2.1 Yleiskuvaus

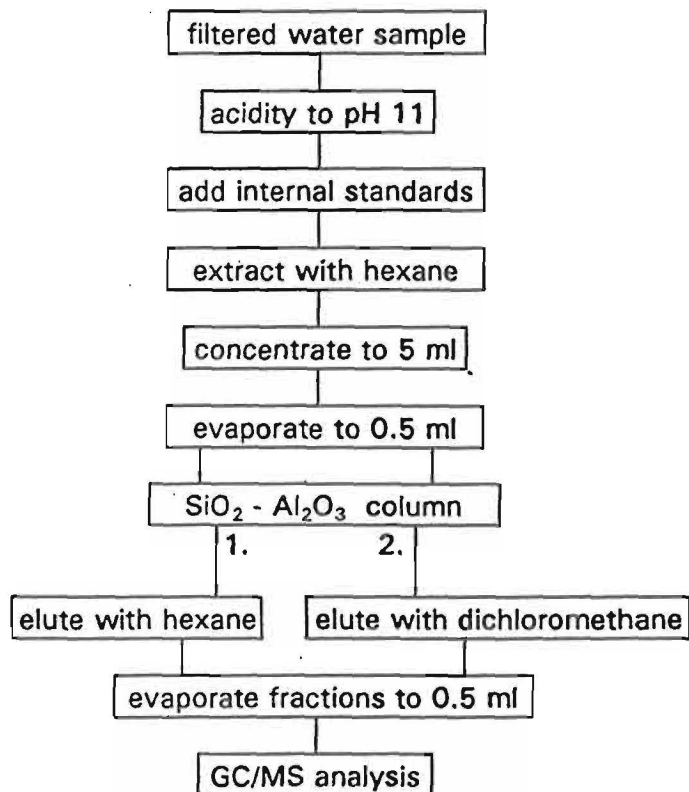
Ennen käsittelyn aloittamista näytevesiä säilytettiin pakastettuina pimeässä. Näytteet saivat sulaa hitaasti jääkaapissa noin kaksi vuorokautta, jonka jälkeen vedet suodatettiin kalvosuodatinsarjalla (45 µm, 10 µm, 2 µm ja 0,45 µm) kiintoaineen poistamiseksi. Tutkittavien yhdisteiden suuren lukumäärän takia kemiallinen karakterisointi oli aloitettava kemiallisella ryhmittelyllä (Paasivirta 1992). Näytevesistä tutkittiin neutraaliaineet (N), heikot hapot (fenoliset yhdisteet P sekä "anisolit" AN) ja vahvat hapot (AC), kukin fraktio saman jäteveden eri annoksesta. Ennen kunkin ryhmän erottelua näyteveteen lisättiin ao. sisäiset standardiaineet. Kemiallisen karakterisoinnin kulku pääpiirteissään on esitetty Kaaviossa 1.



Kaavio 1. Näytevesien kemiallisen karakterisoinnin pääpiirteet.

2.2.2 Neutraaliaineet (N)

Neutraaliaineet eristettiin ja fraktio puhdistettiin soveltaen Paasivirran ym. (1981) menettelyä raakaöljyjäämien analysoimiseen. Aluksi kokeiltiin seuraavaa työohjetta (Kaavio 2):

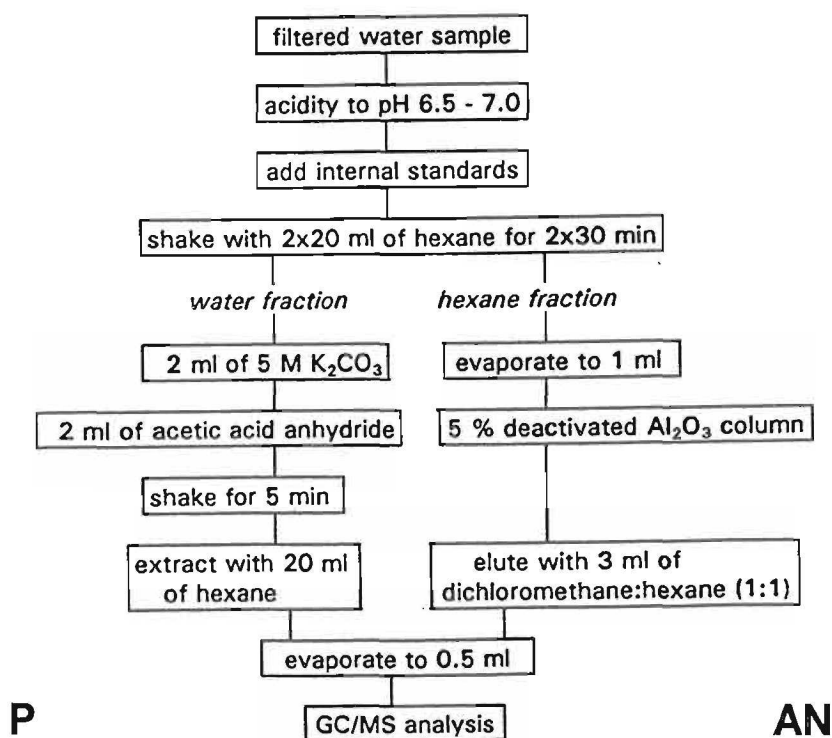


Kaavio 2. Neutraalifraktion eristäminen ja puhdistus.

- 100 mL suodatettua vesinäytettä
- säädetään pH 11 laimealla NaOH:lla
- lisätään sisäiset standardit: androstaani 3,3 µg (alifaattiset hiilivedyt) ja heksaetyylibentseeni 2,2 µg (poolittomat aromaattiset yhdisteet)
- uutto 3 x 50 mL heksaania ravistelijassa 3 x 30 min
- heksaanin haihdutus pyöröhaihduttimella 5 mL
- konsentraatin siirto koeputkeen
- N₂ -virrassa haihdutus noin 0,5 mL
- erottelu SiO₂ (2 g) - Al₂O₃ (1 g) -pylvään läpi 6 mL heksaania, saadaan ensimmäinen fraktio (alifaattiset hiilivedyt), ja sitten 10 mL dikloorimetaania, saadaan toinen fraktio (poolittomat yhdisteet)
- fraktioiden haihdutus N₂ -virrassa noin 0,5 mL:ksi
- GC/MS ajo

Edellä esitetyn ohjeen mukainen puhdistusprosessi osoittautui tässä työssä (näytevesien laimeuden takia) sopimattomaksi, koska neutraali-aineiden pitoisuudet pienenivät siinä määritysrajalle. Sen takia N-jakeen teko uusittiin ja erotteluvaihe silika-aluminapylväällä kahteen N-fraktioon jätettiin pois.

2.2.3 Heikot hapot (fenolit P ja anisolit AN)



Kaavio 3. Heikkojen happojen puhdistus GC/MS analyysia varten.

Fenolien ja anisolin eristämiseen ja määrittämiseen sovellettiin Voss'in ym. (1980) sekä kirjoittajien (Paasivirta 1992, Paasivirta ym. 1992 ja Mikkelsen ym. 1996) kehittämiä menetelmiä (Kaavio 3). **Käsittelyohje:**

- 100 mL suodatettua näytevetä
- säädetään pH 6,5 - 7,0 laimealla NaOH:lla tai HNO₃:lla
- lisätään sisäiset standardit 2,3,6-trikloorifenoli (236TCP) 340 ng ja tetrabromiveratoli (TeBrV) 534 ng
- ravistellaan 2 x 20 mL heksaania 2 x 30 min

Vesikerros (fenolit P)

- asetyloidaan seuraavasti:
 - + 2 mL 5 M K₂CO₃, sekoitus
 - + 2 mL asetanhydridiä, ravistelu kunnes ei enää painetta
- uutto 20 mL heksaania
- heksaanifraktion haihdutus N₂ -virrassa noin 0,5 mL:ksi
- GC/MS ajo

Heksaanikerros (anisolit AN)

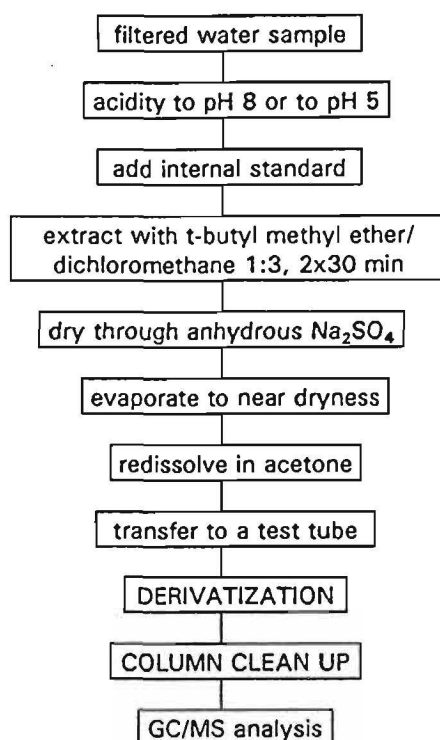
- haihdutus N₂ -virrassa 1 mL:ksi
- valmistetaan 5 % deaktivoitu Al₂O₃ (2 g) -pylväs
- aplikoidaan heksaanikonsentraatti kolonniin
- eluoidaan 3 mL:lla dikloorimetaani:heksaani -seosta (1:1; v:v)
- haihdutus N₂ -virrassa noin 0,5 mL:ksi
- GC/MS ajo

2.2.4 Vahvat hapot (AC)

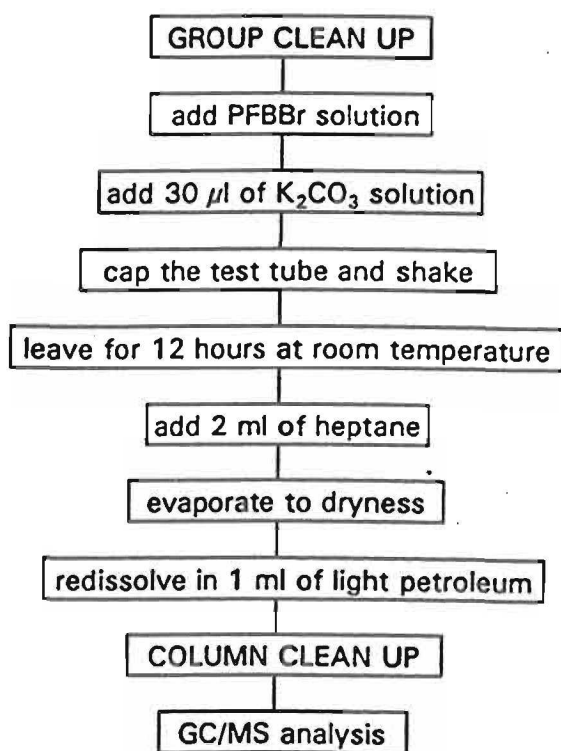
Vahvojen happojen määrittämiseen sovellettiin kirjallisuudessa esitettyjä menetelmiä (Voss ja Rapsomatotis 1985, Lee ym. 1990) (Kaaviot 4, 5 ja 6).

Uuttaminen ja puhdistus

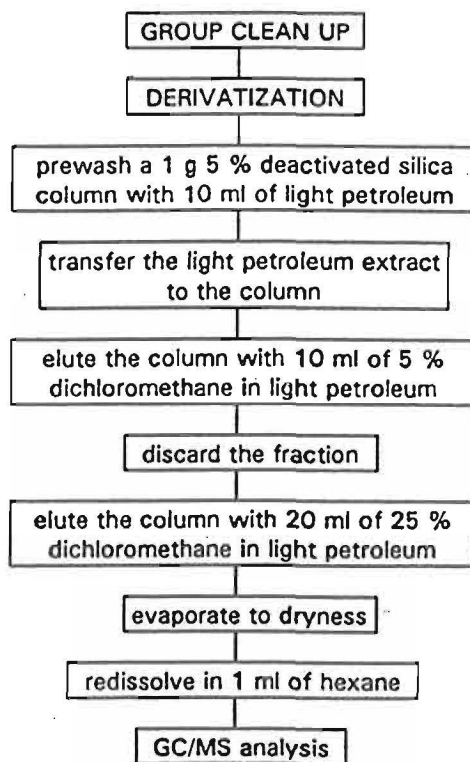
- 100 mL suodatettua näytettä
- pH säädetään 1M NaOH:lla tai HNO₃:lla 8:ksi
- lisätään sisäiseksi standardiksi trikosaanihappoa 3 µg ja surrogaatiksi metyyliheneikosanoaattia 7 µg
- uutetaan 2 x 100 mL:lla tertiäärinen butyyli-metyylieetteri (TBME): dikloorimetaani -seosta (1:3; v:v) ravistelijassa 2 x 30 min
- liuotinkerroksen kuivaus suodattamalla Na₂SO₄ -kerroksen läpi
- huuhtelu TBME:llä
- haihdutetaan pyöröhaihduttimella lähes kuiviin
- siirretään koeputkeen 5 mL:lla asetonia



Kaavio 4. Happofraktion uuttaminen ja puhdistus ennen derivatisointia.



Kaavio 5. Happojen derivatisointi.



Kaavio 6. PFB-esterijohdosten
puhdistus.

Derivatisointi

- 5 mL asetonia olevaan näyteuutteeseen lisätään 100 µL (5 µg) pentafluorobentsyylibromidia (PFBBBr)
- lisätään pisara 0,1 M K₂CO₃ -liuosta
- suljetaan koeputki hyvin ja ravistellaan
- seisotetaan huoneenlämmössä 12 tuntia
- lisätään 2 mL heptania, ravistellaan
- liuos haihdutetaan N₂ -virrassa kuiviin
- jäännös liuotetaan 1 mL petrolieetteriä (kp. 40-60°C)

Pylväspuhdistus

- 1 g:n 5 % deaktivoitu silikageelipylväs pestään 10 mL:lla petrolieetteriä
- 1 mL petrolieetteriä oleva johdos siirretään pylvääseen
- eluoidaan 10 mL:lla 5 % dikloorimetaani:petrolieetteri -seosta (v:v), fraktio hylätään
- eluoidaan 20 mL:lla 25 % dikloorimetaani:petrolieetteri -seosta (v:v)
- eluaatti haihdutetaan N₂ -virrassa kuiviin
- liuotetaan 0,5 mL:aan heksania ja tehdään GC/MS ajo.

2.3 GC/MS analyysit

Näytteet ajettiin korkean erotuskyvyn massaspektrometrillä VG AutoSpec, jossa näytteet syötetään spektrometriin kaasukromatografian kautta. Kolonnina oli HP5 kvartsikapillaarikolonne (25 m x 0,2 mm) ja kantajakaasuna helium virtausnopeudella 1 mL/min. Lämpötilaohjelma neutraaliaine (N) ja heikko happo -fraktioille (P ja AN) oli 100°C + 4°/min 250°C:een, missä pidettiin 10 min. Vahvat hapot -fraktion (AC) ohjelma oli 70°C:ssa 1 min, sitten 25°/min 210°C:een ja sitten 2°/min - 280°C:een, missä pidettiin 15 min.

Massaspektrometriajoista saatiin näytteiden kokonaisionivirta-kromatogrammit (TIC) ja niiden selviä piikkejä vastaavat kokonaismassaspektrit. Jälkimmäisten perusteella pyrittiin tunnistamaan vastaavat yhdisteet käyttäen AutoSpec-systeemin kirjastoverailua, alan julkaisuja ja muutamista malliaineista tehtyjä spektrejä. Tutkimusohjelmassa Jussi Siltala syntetisoi malliaineiksi reteenin (1-metyyli-7-isopropyyli-phenantrienin), 2-metoksi-2',5'-dimetyyli-tilbeenin, sen hapettumistuotteen 2-(2-metoksifenyyli)-1-(2',5'-dimetyyli-fenyyli)-etanolin, syringolin (2,6-dimetoksifenolin) sekä 4-metoksi-3-kloorifenolin.

Tunnistetuille yhdisteille laskettiin suhteelliset pitoisuudet ($\mu\text{g/L}$) kertomalla TIC piikin intensiteettiarvo (pinta-ala) lisätyn sisäisen standardin määrällä litraa kohti ja jakamalla tämä standardin TIC-piikin intensiteetillä. Jotkin yhdisteet esiintyivät useammassa fraktiossa, mutta uuttautuminen muihin kuin kemiallisesti oikeaan jakeeseen oli ollut epätäydellistä. Sillä perusteella tuloksiin valittiin kunkin yhdisteen suurin havaittu suhteellinen pitoisuus.

2.4 Tulokset

ECF- ja TCF-näytteistä tunnistettiin 323 eri yhdistettä. Huomattavan TIC-piikin antaneista aineista jäi kuusitoista fenolifraktion (P) ja kolme anisolifraktion (A) ainetta tunnistamatta. Vain vertailuvesissä (SUO, KUNTA ja KUORI) esiintyviä aineita ei otettu tämän tutkimuksen tuloksiin. Tunnistettujen valkaisu- ja fenolifraktioiden yhdisteiden nimet ja suhteelliset pitoisuudet on esitetty **liitteessä 1**.

Määritysrajat olivat neutraali- ja fenolifraktioissa (N ja P) 0,01, anisoli- ja keussa (AN) 0,05 sekä happofraktiossa (AC) 1,0 $\mu\text{g/L}$. Liitteessä 1 nämä rajat alittavissa tapauksissa suhteelliseksi pitoisuudeksi merkittiin 0 $\mu\text{g/L}$ (valittua ATK-tarkastelutapaa varten). **Huom.:** 0-tapaus ei osoita puuttuvaa tulosta, vaan määritysrajan alapuolella olevaa pitoisuutta. Puuttuvia tuloksia ei ole liitteessä 1 lainkaan. Tulosten yleiskäsittelyjä varten yhdisteet luokiteltiin kemiallisen rakenteen perusteella 22 ryhmään (Taulukko 1).

TAULUKKO 1. Tunnistettujen yhdisteiden (nimet liitteessä 1) ryhmittely.

E	Eetterit	1,56,61,186,192,197,206,208
ETB	Etylibentseeni	2
SHC	Tyydyttyneet alifaattiset ja alisykliset hiilivedyt	3,5,10,13,19,22,25,27,30,33,35,39,44,49,52,54,59,60,67,107,109,113,114,115,116,118,124,131,135,143,145,147,152,153,155,156,158,159,162,170,174,175,177,181,184,185,196,198,200,202,207,211,212,218,232,233,237,240,242,244,245,246,248,249,250,251,252,289,295,301,307,312
S	Rikkiyhdisteet	4,17,20,47,139,146,210,239
K	Ketonit	6,7,8,12,14,16,18,23,45,48,58,62,64,68,69,78,87,92,93,100,123,125,173,176,189,190,203,234,236
UHC	Tyydyttymättömät alifaattiset ja alisykliset hiilivedyt	9,15,34,80,88,89,112,122,128,129,134,201,215,222,227,235,293
ALC	Alkoholit	11,24,38,40,41,55,70,79,82,83,85,137,144,267,168,213,214,224,241
ALD	Aldehydit	21,46,76,95,96,99,105,110,130,191,194,209,219,220,228

TAULUKKO 1 (jatkoa).

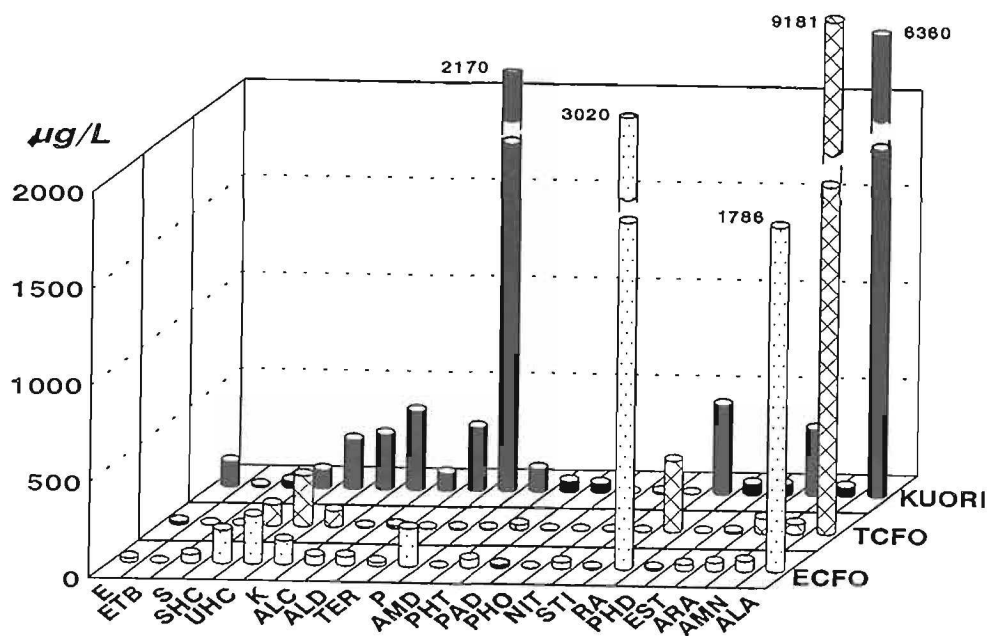
TER	Terpeenialkoholit (bisykl.)	26,29,31,32,36,37,42,43
P	Fenolit	28,50,51,57,65,66,81,102,121,126,127,132,133,136,138,149 151,157,161,164,171,180,186,187,193,199,205,266,278,282
AMD	Amidit	53,154
PHT	Ftalaatit	63,84,86,111,182,223,225,311
PAD	Polyaromaaatiset johdokset	71,72,73,74,75,90,91,94,204,217
PHO	Fosfaatit	77,230
NIT	Nitraatit	98,117
STI	Stilbeneenijohdokset	101,247
RA	Hartsihapot	97,103,163,178,179,183,238,292,317,319,320,321,322,323
PHD	Fenantreenijohdokset	104,108,229
EST	Esterit	106,119,120,140,141,231,243
ARA	Aromaaatiset hapot	142,148,166,269
AMN	Amiinit	169,255,275
ALA	Alifaattiset karboksyylit	150,160,165,172,221,253,254,256,257,258,259, 260,261,262,263,264,265,267,268,270,271,272,273,274,276, 277,279,280,281,283,284,285,286,287,288,290,291,294,296, 297,298,299,300,302,303,304,305,306,308,309,310,313,314, 315,316,318

Ryhmiin pitoisuuksien summat eri näytteissä on esitetty Taulukossa 2.

TAULUKKO 2. Tunnistettujen yhdisteiden pitoisuuksien summat (µg/L)
yhdisteryhmissä eri näytteissä.

Ryhmä	TCFO	TCFB	ECFO	ECFB	KUORI	KUNTA	SUO
E	12.95	<.01	21.94	<.01	129.99	12.17	9.98
ETB	1.82	<.01	0.8	0.46	8.21	2.48	3.25
S	1.63	0.36	43.68	0.83	34.11	24.89	57.34
SHC	109.66	406.89	173.76	74.92	94.66	217.42	805.26
UHC	263.85	228.72	248.69	231.56	253.81	246.73	238.17
K	82.63	18.54	123.51	5.85	284.64	17.73	139.93
ALC	3.24	0.51	46.50	1.53	407.00	1.73	7.63
ALD	12.79	2.73	45.47	4.37	87.82	1.70	1.25
TER	0.77	1.74	19.34	<.01	327.47	0.15	0.68
P	5.65	0.66	197.99	0.85	2169.62	0.04	<.01
AMD	3.10	5.08	0.46	<.01	115.60	<.01	<.01
PHT	25.84	30.63	43.95	88.15	54.31	98.57	24.00
PAD	0.80	0.40	15.17	0.44	44.91	<.01	0.15
PHO	<.01	1.30	2.43	0.62	0.90	<.01	<.01
NIT	1.02	0.86	33.83	4.53	7.54	<.01	<.01
STI	0.20	<.01	7.10	0.33	<.01	<.01	<.01
RA	369.68	190.50	3020.19	28.83	462.20	<1.0	<1.0
PHD	0.70	<.01	9.71	1.84	56.14	<.01	<.01
EST	8.34	5.34	32.12	10.45	56.36	9.50	29.18
ARA	78.42	12.30	43.88	46.65	343.80	161.80	1.90
AMN	52.00	<.01	54.60	<.01	46.80	54.60	<.01
ALA	9181.40	1369.43	1786.25	1028.23	6362.02	570.30	176.60
Yht.	10216.5	2276.0	5971.4	1530.4	11347.9	1419.8	1495.3

Yhdisteryhmistä (Kuva 1) TCF-jätevedessä vallitsivat alifaattiset karboksyylihapot (ALA), mutta ECF-jätevedessä oli huomattavasti enemmän hartsihappoja (RA). Kuorimoveden pääryhmiä olivat alifaattiset karboksyylihapot ja fenolit (P), hartsihapot ja muut aromaattiset hapot (ARA).



Kuva 1. Tunnistettujen yhdisteiden ryhmien pitoisuudet käsittelemättömissä valkaisu-jätevesissä sekä kuorimovedessä.

TCF- ja ECF-näytteiden tunnistetuista aineista väheni pilotti-aktiivilietelaitoksessa 78 ja 74 % kokonaismassasta. Ryhmittäinen tarkastelu (Taulukko 3) osoitti huomattavia eroja eri näytteiden ja yhdisteryhmien kesken. Muutamat aineryhmät jopa lisääntyivät aktiivilietekäsittelyssä. Vastaavat yksittäisten yhdisteiden reduktiot voidaan laskea liitteestä 1.

TAULUKKO 3. Reduktiot prosentteina pilotti-aktiivilietelaitoksessa.

Ryhmä	TCF	ECF	Ryhmä	TCF	ECF
E	100	100	PHT	-19	-101
ETB	100	43	PAD	50	97
S	78	98	PHO	-999	75
SHC	-271	57	NIT	16	87
UHC	13	7	STI	100	95
K	78	95	RA	49	99
ALC	84	97	PHD	100	81
ALD	84	97	EST	36	68
TER	-126	100	ARA	84	-6
P	88	100	AMN	100	100
AMD	-64	100	ALA	85	74

3. TILASTOTARKASTELU

3.1 Käytetyt menetelmät

Biologisten vaikutusten tutkimuksista, jotka on selostettu tämän raporttisarjan edellisissä osissa, saatiin varsin monista efekteistä numeerinen vaikutusmuuttuja kahdelle vertailuvedelle (SUO ja KUNTA) sekä neljälle TCF- ja ECF- valkaisu-jätevedelle. Jälkimmäiset oli otettu pilottilaitoksesta ennen (-O = *Obehandlad*) ja jälkeen (-B = *Behandlad*) biologisen puhdistuksen. Akuuttimyrkyllisyydet oli määritetty em. kuudelle näytevedelle laboratoriossa. Krooniset vaikutukset oli mitattu mesokosmoksessa käyttäen nollavesilinjaa ja kymmentä kuuden näyteveden laimennuslinjaa. Vertailuvedet (SUO ja KUNTA) oli tutkittu vain 400-kertaisella laimennuksella. Tehdasvesille oli käytetty kahta eri laimennusta: HD (*High Dose*) näytteet (TCFOHD, TCFBHD, ECFOHD ja ECFBHD) olivat 400- ja LD- (*Low Dose*) näytteet (TCFOLD, TCFBLD, ECFOLD ja ECFBLD) 2000-kertaisia laimennuksia.

Kunkin vaikutusmuuttujan vaihtelu eri näytteissä pyrittiin selittämään yhdisteiden pitoisuuksilla, jotka LD-näytteissä pidettiin alkuperäisinä µg/L-arvoina. SUO, KUNTA ja HD-näytteille saatiin vastaavat vertailupitoisuudet kertomalla alkuperäiset pitoisuudet viidellä. Aluksi määritettiin Pearson-korrelaatiot kaikkien vaikutusmuuttujien sekä kemiallisessa karakterisoinnissa turnistetujen yhdisteiden ryhmien (22) ja yksittäisten yhdisteiden (323) kesken. Korrelaation merkitsevyys oli tulkittavissa siten, että ao. yhdiste saattaisi osallistua akuuttiin vaikutukseen myrkkynä ((+)-korrelaatio) tai vastamyrkkynä ((-)-korrelaatio). Kroonisten vaikutusten merkitsevä (+)-korrelaatio viittasi ao. aineen mahdolliseen stimulantivaikutukseen ja (-)-korrelaatio inhibitioon.

Alle määritysrajan olevat pitoisuudet käsiteltiin nollina. SPSS-ohjelmistossa on myös puuttuvien havaintojen variaatio, missä puuttuva havainto esim. otetaan mukaan saman muuttujan mitattujen havaintojen keskiarvona. Tämän vaihtoehdon käyttäminen johtaisi tässä tapauksessa virheellisiin tuloksiin. Aineistossa ei ole yhtään puuttuvaa havaintoa, vaan nollat edustavat alle havaintorajan olevia pitoisuuksia; niiden käyttämisen aiheuttama virhe voi olla vain merkityksettömän pieni.

Korrelaatiot muodostavat lähtökohdan eri vaikutuksiin liittyvien yhdisteiden hakemiselle aineiden keskinäisen korrelaation paremmin eliminoivilla monimuuttujamenetelmillä, jotka selostetaan tämän monistesarjan seuraavassa osassa.

3.2 Yhdisteryhmien vaihtelu näytteissä

Vaikka eri näytteiden aineryhmien pitoisuudet erosivatkin suuresti toisistaan, kuudentoista aineryhmän kesken esiintyi merkitseviä korrelaatioita (Taulukko 4).

TAULUKKO 4. Yhdisteryhmien keskinäisiä kaksisuuntaisia Pearson-korrelaatioita. Merkitsevyydet : * = $p < 0.05$; ** = $p < 0.01$.

Ryhmä	ALD	AMN	EST	K	NIT	P	PAD
ALC	.9565**	.4383	.7750	.6014	.9757**	.9897**	.9880**
ALD	1.000	.5540	.5970	.5010	.9666**	.9753**	.9782**
AMN	.5540	1.000	.0908	.1827	.4154	.4733	.4648
EST	.5970	.0908	1.000	.8554*	.6542	.6785	.6713
K	.5010	.1827	.8554*	1.000	.4327	.4949	.4915
NIT	.9666**	.4154	.6542	.4327	1.000	.9919**	.9932**
P	.9753**	.4733	.6785	.4949	.9919**	1.000	.9997**
PAD	.9782**	.4648	.6713	.4915	.9932**	.9997*	1.000
PHD	.9682**	.4216	.6424	.4233	.9970**	.9830**	.9851**
PHO	.7943	.1093	.3957	.1609	.8658*	.8464*	.8529*
RA	.9881**	.4959	.6372	.4958	.9838**	.9952**	.9964**
S	.3098	.1017	.9026*	.7821	.3745	.4290	.4131
SHC	-.3485	-.5193	.4209	.4887	-.2891	-.2341	-.2425
STI	.9744**	.4587	.6753	.4787	.9963**	.9991**	.9992**
TER	.9667**	.4395	.6719	.4966	.9850**	.9967**	.9967**
UHC	.3942	.8420*	.0792	.3950	.1747	.2375	.2355
Ryhmä	PHD	PHO	RA	S	STI	TER	
ALC	.9657**	.7965	.9793**	.5433	.9875**	.9856**	
ALD	.9682**	.7943	.9881**	.3098	.9744**	.9667**	
AMN	.4216	.1093	.4959	.1017	.4587	.4395	
EST	.6424	.3957	.6372	.9026*	.6753	.6719	
K	.4233	.1609	.4958	.7821	.4787	.4966	
NIT	.9970**	.8658*	.9838**	.3745	.9963**	.9850**	
P	.9830**	.8464*	.9952**	.4290	.9991**	.9967**	
PAD	.9851**	.8529*	.9964**	.4131	.9992**	.9967**	
PHD	1.000	.8439*	.9755**	.3468	.9898**	.9711**	
PHO	.8439*	1.000	.8507*	.1136	.8494*	.8736*	
RA	.9755**	.8507*	1.000	.3739	-.1045	-.1755	
S	.3468	.1136	.3739	1.000	.9928**	.9943**	
SHC	-.3333	-.2216	-.2629	.6251	.4160	.4260	
STI	.9898**	.8494*	.9928**	.4160	1.000	.9938**	
TER	.9711**	.8736*	.9943**	.4260	.9938**	1.000	
UHC	.1993	-.1827	.2847	.0561	.2222	.2010	

Havaitut merkitsevät korrelaatiot yhdisteryhmien kesken kertovat eri näytteissä olevien aineiden yhteisestä alkuperästä puun ligniinin ja uute-aineiden muuntumistuotteina, joita esiintyy myös suo- ja kuntavesissä.

3.3 Vertailu vaikutuksiin Pearson-korrelaatioilla

3.3.1 Akuutit myrkyvaikutukset

SYKE:ssa (J.Ahtiainen) oli mitattu kuudesta näytteestä akuuttivaikutuksia kolmella eri testillä:

ALGAE = levätesti

LBACT = valobakteeritesti

MITOKOND = mitokondriotesti

Tulokset oli esitetty suhteellisina myrkytehon arvoina T, jotka oli laskettu siten että luku 100 jaettiin testatun jäteveden sillä laimennusprosentilla, mikä aiheutti 50 % letaalin vaikutuksen (LC50 laimennusprosentilla). T-arvot olivat siis sitä suurempia, mitä suurempi oli testissä havaittu myrkyllisyys. Tilastolaskuihin käytetyt T-arvot ovat taulukossa 5.

TAULUKKO 5. Toksisuusarvot $T = 100 / (\text{LC50 laimennus } \%)$

Sample	ALGAE	LBACT	MITOKOND
SUO	1	1	1
KUNTA	2.5	1	1
TCFO	9.09	40	1.21
TCFB	5.88	1	2.26
ECFO	3.33	3.33	7.35
ECFB	2	1.43	12.35

Pearson-korrelaatioista vaikutusten kesken vain LBACT/ALGAE oli jokseenkin merkitsevä : $R = 0.8361$, $p = 0.038^*$. Merkitsevä yhdisteryhmän Pearson-korrelaatio ($** p < 0.01$) saatiin vain ryhmän ALA (alifaattiset karboksyylihapot) ja valobakteeritestin (LBACT) kesken, $R = 0.991^{**}$, sekä jokseenkin merkitsevä korrelaatio ($* p < 0.05$) ALA:n ja levänkasvun eston (ALGAE) kesken, $R = 0.885^*$.

Yksittäiset yhdisteet, jotka korreloivat voimakkaasti ($IRI > 0.5$) jonkin akuuttivaikutuksen kanssa, esiintyvät taulukossa 6. Pearson-korrelaatioiden perusteella kaikkein todennäköisimmin levänkasvun (ALGAE) estoon vaikuttavia ovat viisi tyydyttyynyttä hiilivetyä (SHC: haaroittunut undekaani, 1-metyylipentyyliisykloheksaani, 7-pentyylibisykloheksaani, jokin sykloheksaanijohdos ja jokin pentakosaanijohdos) sekä kaksi alifaattista karboksyylihappoa (ALA: voihappo ja dodekaanihappo).

TAULUKKO 6. Voimakkaimmat ($|R| > 0.5$) yksittäisten yhdisteiden ja akuuttitoksisuuden kaksisuuntaiset Pearson-korrelaatiot. Merkitsevyys: * ($p < 0.05$); ** ($p < 0.01$).

Yhdiste	Ryhmä	ALGAE	LBACT	MITOK
N1	E	.1726	.5090	-.6648
N2	ETB	-.2836	.1183	-.5922
N13	SHC	-.1556	-.0091	-.5128
N19	SHC	.9359**	.7146	-.4296
N33	SHC	.8959*	.6032	-.4172
N39P6	SHC	.9360**	.6347	-.3373
N44	SHC	.8421*	.4857	-.3907
N49	SHC	.9206**	.6505	-.4098
N52	SHC	.6886	.2415	-.3422
N54	SHC	.7274	.2982	-.3552
N60	SHC	.9663**	.8208*	-.4100
N109AN79	SHC	.1556	.2477	.5725
N113	SHC	-.2046	-.2094	.5992
N114	SHC	-.2333	-.2264	.6748
N115	SHC	-.2298	-.2244	.6658
P40AN44	SHC	.6445	.7941	.0655
P43	SHC	-.0038	.5115	.0329
P50AN52	SHC	-.6119	-.2517	-.3434
P58	SHC	.8109	.9908**	-.2144
P65	SHC	-.5198	-.2468	-.3437
P74AN85	SHC	-.0296	.0841	.8152*
AN19	SHC	.0839	.4208	-.7314
AN40	SHC	.6229	.7867	-.4933
AN62	SHC	.5801	.7228	.1273
AN63	SHC	.7113	.9516**	-.1771
AN70	SHC	.3441	.5752	.5846
AN73	SHC	.6185	.8441*	.1414
AN81	SHC	.9419**	.9495**	-.3779
AN82	SHC	.4079	.6013	.5774
AN84	SHC	.3415	.5186	.6405
AN86	SHC	.1726	.3792	.7436
AN87	SHC	.1765	.3715	.7503
AN89	SHC	-.7105	-.6660	.4740
N4	S	-.6498	-.3887	-.3322
P27	S	.8354*	.9983**	-.3124
P34	S	.8354*	.9983**	-.3124
AN31	S	.4714	.6178	-.5114
N7	K	-.5250	-.2716	-.2139
N8	K	.6677	.8861*	-.5235
N23	K	.9132*	.6567	-.4322
N48	K	.9122*	.6300	-.4082
N58	K	.8354*	.9983**	-.3124
N62	K	.8357*	.9986**	-.3111
N69	K	-.1674	-.1862	.5006
N78	K	.8835*	.5661	-.4017
N87	K	.7917	.9420**	-.1631
N92	K	-.3207	-.2035	.8536*
N100	K	-.1121	-.1098	.5291
P12	K	-.5654	-.3636	.2513
N9	UHC	-.0627	.1723	-.6442
N15	UHC	.8323*	.9981**	-.3163
N34	UHC	.8354*	.9983**	-.3124
N80	UHC	.8354*	.9983**	-.3124
P8	UHC	.6277	.8467*	.1594
AN21	UHC	.8354*	.9983**	-.3124
AN37	UHC	.8354*	.9983**	-.3124
AN46	UHC	.1307	.3467	.5899
AN55	UHC	-.3678	-.2444	.8138*
N83	UHC	.8354*	.9983**	-.3124

TAULUKKO 6 (JATKOA)

Yhdiste	Ryhmä	ALGAE	LBACT	MITOK
N85	UHC	-.3207	-.2035	.8536*
AN49	UHC	-.2656	-.2442	.7590
N21	ALD	.8529*	.9904**	-.3642
N76	ALD	.8354*	.9983**	-.3124
N99	ALD	-.1790	-.1935	.5314
AN13	ALD	.8354*	.9983**	-.3124
AN30	ALD	.8354*	.9983**	-.3124
AN41	ALD	.3724	.6655	-.0215
N32	TER	.7921	.9895**	-.3575
N57	P	-.3207	-.2035	.8536*
N65	P	.8354*	.9983**	-.3124
N66P25	P	-.2039	-.2122	.5634
N81	P	.8354*	.9983**	-.3124
N102	P	-.1038	-.1443	.3302
P26	P	.4069	.6284	.4278
P45	P	-.3207	-.2035	.8536*
N53	AMD	.7736	.3694	-.3702
N63AN20	PHT	.7310	.8621*	-.1085
N84	PHT	-.3207	-.2035	.8536*
N86	PHT	.6821	.2440	-.4651
N111	PHT	-.4551	-.4043	.8159*
AC63	PHT	-.1830	-.0975	-.6057
AN39	PAD	.8354*	.9983**	-.3124
N108	PHD	-.1367	-.1216	.6081
P4	EST	-.5274	-.1674	-.2216
P5	EST	-.5244	-.3012	-.1694
P30	ARA	.8354*	.9983**	-.3124
AC25	AMD	.5946	.7557	-.4994
P38AC46	ALA	.8699*	.9850**	-.1796
P53	ALA	-.2474	-.2627	.8185*
AN45	ALA	-.3007	-.6394	.5843
AC1	ALA	.8268*	.4918	-.5497
AC2	ALA	.8083	.3573	-.2800
AC5	ALA	.9282**	.8203*	-.0822
AC6	ALA	.7497	.3120	-.1087
AC8	ALA	.8677*	.8176*	.0962
AC10	ALA	.7714	.8915*	.0390
AC12	ALA	-.5928	-.6308	.4836
AC13	ALA	-.4899	-.4631	.8786*
AC14	ALA	.8365*	.9976**	-.2641
AC18	ALA	.8339*	.9929**	-.2429
AC22	ALA	.8354*	.9983**	-.3124
AC24	ALA	.8365*	.9984**	-.2795
AC26	ALA	.8354*	.9983**	-.3124
AC27	ALA	.8354*	.9983**	-.3124
AC30	ALA	.8356*	.9989**	-.3019
AC32	ALA	.8354*	.9983**	-.3124
AC36	ALA	.9630**	.7773	-.3595
AC37	ALA	.8354*	.9983**	-.3124
AC42	ALA	.8354*	.9983**	-.3124
AC45	ALA	.8354*	.9983**	-.3124
AC48	ALA	.8354*	.9983**	-.3124
AC50	ALA	.8354*	.9983**	-.3124
AC52	ALA	.8354*	.9983**	-.3124
AC54	ALA	.8354*	.9983**	-.3124
AC56	ALA	.9020*	.9669**	-.4228
AC58	ALA	.8377*	.9999**	-.2959
AC65	ALA	.8363*	.9978**	-.3241
AC67	ALA	.8354*	.9983**	-.3124

Valobakteeritestissä (LBACT) myrkkyvaikutukseen korrelaatioiden (taulukko 6) mukaan suurimmalla todennäköisyydellä osallistuvia aineita ovat:

- *Tyydyttyneet hiilivedyt*: haarautunut eikosaani (P58), metyyliunkosaani (AN63) ja jokin pentakosaanijohdos (P34)
- *Rikkiyhdisteet*: 2-etyyli-5-propyyli tiofeeni (P27) ja 2-asetyyli-5-propyyli tiofeeni (P34)
- *Ketonit* (oksoyhdisteet): 3,4-dihydroksinaftalenoni (N58), 6,10-dimetyyli-5,9-undekadieeni-2-oni (N62) ja trimetyylipentadekatrienoni (N87)
- *Tyydyttymättömät hiilivedyt*: noneeni (N15), dekeeni (N34), haarautunut oktadekeeni (N80), 6-propyyliundekeeni (AN21), haarautunut heksadekeeni (AN37) ja spatulenoli (N83)
- *Aldehydit*: nonanaali (N21), 3,4,5-trimetoksibentsaldehydi (N76), 6-butyli-2-oktenaali (AN13) ja 2-(fenyylietyylimetyleeni)-heksanaali (AN30)
- *Fenolit*: 2-metoksi-propyyli-fenoli (N65) ja jokin fenolijohdos (N81)
- *Alifaattiset karboksyylihapot*: heptaanihappo (AC14), oktaanihappo (AC18), haarautunut oktaanihappo (AC22), nonaanihappo (AC24), undekaanihappo (AC26), haarautunut dekaanihappo (AC27), dekaanihappo (AC30), undekaanihappo (AC32), tridekaanihappo (AC37), tetradekaanihappo (AC42), haarautunut tetradekaanihappo (AC45), pentadekadieenihappo (AC48), pentadeekaanihappo (AC50), pentadekaanihappo (AC52), heksadekadieenihappo (AC54), heksadeekaanihappo (AC56), palmitiinihappo (AC58), linoleenihappo (AC65) ja linoleenihappojohdos (AC67).
- *Muita*: naftaleenijohdos (AN39) sekä bentsoehappojohdos (P30)

Suuri osa edellä luetelluista valobakteeritestin tulosten kanssa merkittävästi korreloivista yhdisteistä esiintyy vain TCF-valkaisun jätevedessä (liitteessä 1). Minkään aineen pitoisuudet eivät korreloi merkittävästi mitokondriotestin tulosten kanssa.

3.3.2 Krooniset vaikutukset kaloihin

Kroonisia biologisia vaikutuksia oli tutkittu mesokosmoslaitteistoissa kuudella 400-kertaisesti ja neljällä 2000-kertaisesti laimennetulla näytevedellä. Kirjolohia oli altistettu mesokosmoslinjoihin liitetyissä erillisissä altaissa. Kaloista oli mitattu seuraavat arvot:

LSI = maksan somaattinen indeksi, CF = kuntokerroin, HB = hemoglobiini, GROWTH = kalan keskimääräinen kasvu/vrk, HCT = hematokriitti, LCT = leukokriitti, MCHC = punasolujen keskimääräinen hemoglobiini, EROD = maksan entsyymi, UDP = maksan entsyymi, GLYC = maksan glykogeeni ja LIPID = maksan lipidipitoisuus.

Kalatestitulosten (taulukko 7) keskinäiset merkitsevät korrelaatiot (taulukko 8) ovat melko harvinaisia. Tämän perusteella kukin yksittäinen vaikutus voidaan selittää erikseen orgaanisten yhdisteiden pitoisuuksilla näytevesissä korrelaatioilla ja monimuuttuja-analyysillä.

TAULUKKO 7. Kalatestitulokset.

Näyte	LSI	CF	HB	GROWTH	HCT	LCT
SUO	1.19	1.26	1.28	69.30	36.10	.86
KUNTA	1.16	1.30	1.44	72.80	37.40	.89
TCFOLD	1.25	1.34	1.16	76.90	33.80	1.06
TCFOHD	1.22	1.33	1.21	93.90	33.90	.91
TCFBLD	1.33	1.33	1.19	103.30	33.80	.77
TCFBHD	1.18	1.34	1.12	78.10	33.30	.81
ECFOLD	1.29	1.35	1.22	72.30	33.60	1.03
ECFOHD	1.30	1.30	1.23	76.60	35.00	.84
ECFBLD	1.27	1.37	1.13	80.00	33.70	.92
ECFBHD	1.20	1.26	1.31	74.30	35.40	1.03
Näyte	MCHC	EROD	UDP	GLYC	LIPID	
SUO	3.55	12.50	564.30	5.77	1.79	
KUNTA	3.85	12.70	732.20	6.79	1.67	
TCFOLD	3.43	10.70	732.10	7.58	1.48	
TCFOHD	3.57	11.17	677.60	6.47	1.74	
TCFBLD	3.52	12.18	727.10	8.31	1.45	
TCFBHD	3.36	10.79	716.20	5.88	1.97	
ECFOLD	3.63	12.19	768.90	6.69	1.66	
ECFOHD	3.51	11.36	677.70	7.39	1.73	
ECFBLD	3.35	14.50	788.30	6.34	1.07	
ECFBHD	3.70	11.34	709.90	7.16	1.73	

TAULUKKO 8. Kalatestitulosten keskinäiset kaksisuuntaiset Pearson-korrelaatiot.

	LSI	CF	HB	GROWTH	HCT	LCT
LSI	1.000	.4435	-.4722	.4818	-.5371	-.0717
CF	.4435	1.000	-.6926*	.3699	-.7655**	.0535
HB	-.4722	-.6926*	1.000	-.3514	.9307**	.0799
GROWTH	.4818	.3699	-.3514	1.000	-.4510	-.4442
HCT	-.5371	-.7655**	.9307**	-.4510	1.000	-.0584
LCT	-.0717	.0535	.0799	-.4442	-.0584	1.000
MCHC	-.3443	-.5622	.9415**	-.2170	.7544*	.2015
EROD	.1413	.1789	.1022	-.0647	.1843	-.1213
UDP	.3419	.7025*	-.2513	.1562	-.4242	.3130
GLYC	.6378*	.0483	.0228	.5023	-.0978	.0463

	MCHC	EROD	UDP	GLYC	LIPID
LSI	-.3443	.1413	.3419	.6378*	-.5098
CF	-.5622	.1789	.7025*	.0483	-.5065
HB	.9415**	.1022	-.2513	.0228	.2753
GROWTH	-.2170	-.0647	.1562	.5023	-.2544
HCT	.7544*	.1843	-.4242	-.0978	.2330
LCT	.2015	-.1213	.3130	.0463	-.1687
MCHC	1.000	.0089	-.0941	.1295	.2894
EROD	.0089	1.000	.2586	-.2028	-.6958*
UDP	-.0941	.2586	1.000	.3120	-.5539
GLYC	.1295	-.2028	.3120	1.000	-.3172

Yhdisteryhmät, jotka korreloivat voimakkaan ($|R| > 0.4$) positiivisesti (+) tai negatiivisesti (-) kalavaikutusten kanssa, esitetään taulukossa 9.

TAULUKKO 9. Voimakkaimmat ($|R| > 0.4$) yhdisteryhmien ja kroonisten kalavaikutusten korrelaatiot.

	LSI	CF	HB	GROWTH	HCT	LCT
ALA	-.1215	.1569	-.1159	.4206	-.2152	.0370
AMD	-.2564	.3156	-.4732	.3392	-.4846	-.3921
AMN	-.1011	-.0796	.4573	.0308	.3972	-.1084
ARA	-.5072	-.2573	.7695**	-.1040	.6774*	.0080
E	-.0271	-.3196	.4060	-.1589	.4646	-.2210
EST	-.1038	-.6648*	.3373	-.4216	.5116	-.2524
ETB	-.5723	-.5898	.6575*	-.2937	.7633*	-.1512
K	-.0669	-.4532	.1399	-.2029	.3022	-.2811
NIT	.4093	-.1706	.0130	-.1651	.0591	-.1265
P	.4342	-.1127	-.0067	-.1420	.0459	-.1695
PAD	.4231	-.1207	-.0125	-.1382	.0398	-.1712
PHD	.4006	-.1938	.0319	-.1589	.0688	-.0863
PHT	-.6077	-.6322*	.8060**	-.3692	.7720**	.0580
RA	.4161	-.0835	-.0438	-.0962	.0023	-.1892
S	-.1594	-.6148	.4474	-.4743	.6420*	-.2947
SHC	-.5142	-.5428	.1911	-.3580	.4091	-.4388
STI	.4289	-.1338	.0042	-.1509	.0544	-.1508
TER	.4048	-.1119	-.0347	-.1438	.0293	-.2215
UHC	-.6680*	-.6521*	.4940	-.2409	.5597	-.2741

TAULUKKO 9 (jatkoa).

	MCHC	EROD	UDP	GLYC	LIPID
ALA	-.0036	-.4097	-.1779	-.1029	.2325
AMD	-.4182	-.5144	-.0436	-.3143	.4893
AMN	.4485	-.1603	-.0913	.0821	.2238
ARA	.7391*	.0042	.0462	-.0053	.1923
E	.3129	-.1311	-.4678	-.0490	.3297
EST	.1613	-.0798	-.7582*	-.2278	.4377
ETB	.4958	.1139	-.7336*	-.4208	.3318
K	.0047	-.1496	-.8418**	-.3112	.4235
PHT	.7239*	-.0112	-.0581	-.0587	.3151
S	.2353	.1172	-.7400*	-.2680	.3255
SHC	-.0150	-.0192	-.8301**	-.6078	.5335
UHC	.3775	-.3448	-.6248	-.4118	.7343*

Korrelaatioiden perusteella aromaattiset hapot (ARA) stimuloivat merkitsevästi HB- ja MCHC-arvoja sekä ftalaatit (PHT) HB- ja HCT-arvoja. Merkitseviä kalan maksaentsyymien UDP inhibiittoreita ovat ketonit (K) ja tyydyttyneet hiilivedyt (SHC).

Yksittäisten yhdisteiden voimakkaimmat ($|R| > 0.5$) korrelaatiot kalavaikutusten kanssa on koottu taulukkoon 10.

TAULUKKO 10. Voimakkaimmat ($|R| > 0.5$) kalatestitulosten ja yksittäisten yhdisteiden väliset korrelaatiot.

	LSI	CF	HB	GROWTH	HCT	LCT
AC12	-.1806	-.5892	.5756	-.4673	.6382*	-.1672
AC17	.1032	-.3893	.4012	-.3693	.5088	-.2637
AC19	-.5040	-.2513	.7670**	-.1021	.6731*	.0101
AC3	-.2079	-.2458	.7104*	-.2934	.7018*	-.1640
AC63	-.7027*	-.4019	.7804**	-.2634	.8064**	-.2292
AC66	-.3773	-.1998	.6191	-.2762	.6295	-.3215
AN19	-.5919	-.3524	.5634	-.0843	.6027	-.1097
AN22	-.5202	-.5023	.7616*	-.3102	.6820*	.2626
AN41	-.5335	-.2796	.5068	.1044	.3838	.2605
AN42	-.6318	-.3342	.5545	-.0879	.4554	.0008
AN45	-.5882	-.6000	.2551	-.3176	.3238	-.2356
AN78	-.8325**	-.4466	.3558	-.0596	.3295	-.0264
AN88	-.6178	-.6630*	.6048	-.3268	.6483*	-.2388
AN89	-.6357*	-.7427*	.6199	-.3794	.6916*	-.2415
N106	-.6249	-.4365	.7507*	-.2554	.6660*	.1573
N107P68A	-.1704	-.6199	.2038	-.3509	.4053	-.1847
N109AN79	.5170	.2197	-.1741	-.2005	-.2900	.4956
N111	-.3329	-.5663	.5559	-.3251	.4957	.2661
N2	-.5723	-.5898	.6575*	-.2937	.7633*	-.1512
N3	-.4850	-.2024	.7784**	-.2309	.7359*	-.0751
N4	-.2897	-.6399*	.5014	-.4877	.7005*	-.2811
N47AN3	-.1651	-.6816*	.1867	-.4246	.4013	-.2049
N7	-.1366	-.5718	.1832	-.3945	.4052	-.2427
N70	-.7764**	-.3999	.6776*	-.2110	.7230*	-.2742
N9	-.6026	-.3376	.7562*	-.1711	.7635*	-.1225
P11AN15	-.3539	-.5242	.1544	-.3416	.3691	-.2628
P12	-.3161	-.7598*	.1625	-.4139	.3520	-.1381

TAULUKKO 10 (jatkoa 1)

	LSI	CF	HB	GROWTH	HCT	LCT
P2	-.2775	-.5489	.1879	-.3558	.3980	-.1956
P35AN43	-.2154	-.3891	.7406*	-.3604	.7667**	-.1758
P36	-.3146	-.5435	.1878	-.3248	.3872	-.1683
P4	-.3172	-.6913*	.3581	-.4011	.5529	-.1651
P41AN48	-.3113	-.5248	.1783	-.3078	.3763	-.1767
P43	-.5268	-.6382*	.4886	-.1293	.5072	.1643
P47	-.2514	-.2438	.7336*	-.2899	.7200*	-.1548
P5	-.4517	-.7525*	.3660	-.4151	.5578	-.3325
P50AN52	-.4353	-.7244*	.6299	-.4633	.7965**	-.2173
P55	-.2767	-.5492	.1886	-.3560	.3987	-.1949
P70	-.3235	-.6943*	.2887	-.2811	.4350	-.0251
P71AN80	-.5557	-.2992	.2074	-.1702	.1729	-.0311
	MCHC	EROD	UDP	GLYC	LIPID	
AC19	.7381*	.0050	.0576	.0001	.1878	
AC2	-.2611	-.5623	-.0636	-.2618	.5862	
AC3	.6107	.1250	.0579	.1062	.1365	
AC6	-.3607	-.5959	-.0826	-.1959	.5700	
AC63	.6466*	.0940	-.2865	-.3007	.3460	
AC66	.5055	.0452	.0542	-.0419	.2882	
AN19	.4672	.0602	-.5697	-.3978	.2704	
AN22	.7250*	.1559	.1690	.0591	.0328	
AN31	.5266	-.0620	-.0196	-.0907	.1328	
AN41	.5572	-.1310	-.1272	-.1099	.1605	
AN42	.5540	-.2318	.0952	-.0824	.3951	
AN45	.1552	-.3228	-.3161	-.3252	.6535*	
AN56	.1141	-.3120	-.6526*	-.3710	.7330*	
AN78	.3305	-.2600	-.2780	-.4126	.5050	
AN88	.4856	-.2785	-.4226	-.2699	.6633*	
AN89	.4783	-.2450	-.5286	-.3199	.6732*	
N106	.7142*	.0866	.1670	-.0162	.1339	
N107P68A	.0304	.0334	-.9041**	-.3882	.3252	
N111	.5343	-.0126	.1260	.1247	.1226	
N13	-.1379	-.0279	-.8540**	-.6022	.4065	
N2	.4958	.1139	-.7336*	-.4208	.3318	
N23	-.3289	-.5016	-.1213	-.3225	.4304	
N24	.0061	.1693	-.8303**	-.4734	.2329	
N3	.6956*	.2332	.1304	-.0208	.0585	
N4	.2780	.1853	-.7683**	-.3500	.3079	
N47AN3	.0011	.0132	-.8663**	-.3709	.3658	
N48	-.3369	-.5065	-.0770	-.3026	.4239	
N49	-.3292	-.5057	-.0806	-.2990	.4182	
N6	-.0074	-.0230	-.9081**	-.4393	.3211	
N64AC11	-.3820	-.4114	-.4465	-.5391	.6549*	
N7	-.0102	.1090	-.8529**	-.3832	.2813	
N70	.5434	.0305	-.4174	-.4273	.4259	
N78	-.3585	-.5069	-.0660	-.3120	.4393	
N86	-.1778	-.4149	.0236	-.3403	.5015	
N9	.6505*	.1356	-.3282	-.2604	.2236	
P11AN15	-.0338	.1230	-.8348**	-.5274	.3087	
P12	.0004	-.0808	-.8204**	-.4167	.4460	
P15	-.1828	-.3847	-.6139	-.1906	.5344	
P16	-.0388	-.1683	-.6462*	-.1038	.3182	
P2	.0035	.1627	-.8383**	-.4664	.2409	
P35AN43	.6140	.1019	-.1219	.0531	.2090	
P36	.0138	.1524	-.8426**	-.4845	.2393	

TAULUKKO 10 (jatkoa 2)

	MCHC	EROD	UDP	GLYC	LIPID
P4	.1683	.0984	-.9018**	-.4287	.3264
P41AN48	.0068	.1448	-.8474**	-.4886	.2422
P43	.4363	-.0992	-.6458*	-.3168	.3102
P47	.6343*	.1429	.0693	.0900	.1280
P5	.1688	-.1348	-.9058**	-.4836	.6153
P50AN52	.4203	.1311	-.8022**	-.3799	.3702
P55	.0042	.1632	-.8383**	-.4656	.2402
P56	.0067	.1127	-.8627**	-.4983	.2539
P62AN59	.0295	.1244	-.8696**	-.4926	.2800
P65	.0547	.1773	-.8382**	-.4679	.2502
P69	.0021	.1444	-.8549**	-.4442	.2580
P70	.1566	-.0275	-.8959**	-.4046	.3383

Taulukon 10 korrelaatioiden perusteella voidaan tehdä seuraavat johtopäätökset:

- **LSI-inhibiittoreita** ovat tetrakosaani (AN78) ja 1-metyyli-4-(1-metyylietyyli)-1,2-sykloheksaanidioli (N70),
- **HB-stimulaattoreita** ovat bentsoehappo (AC19), jokin ftalaatti (AC63) sekä 1,3-bis-metyleenisyklopentaani (N3),
- **HCT-veriarvon stimulaattoreita** ovat ftalaatti (AC63), oktadekaani (P35AN43) ja eikosaani (P50AN52),
- **UDP-maksaentsyymin inhibiittoreita** ovat trikosaani (N107P68, AN68), butyyli-1-sykloheksaani (N13), 2-fenyylietanol i(N24), 2-metyyli-2-pentaanitioli (N4), bentsotiatsoli (N47AN3), 2-metyyli-2-pentanoni (N6), 3-hekseeni-2-oni (N7), tetradekaani (P11AN15AC9), 4-tridekanoni (P12), 4-metyylipentyyli-1-sykloheksaani (P2), jokin bentsoehappojohdos (P36), glyserolidiasetaatit (P4 ja P5), nonadekaanim (P41AN48), eikosaani (P50AN52), 2-hydroksi-3-(3-metyyli-1-butenyyli)-naftaleenidioni (P55), asetyyli-dihydroksi-dimetyyli-bentsofuranyyli-pentaanidioni (P56), unkosaani (P62AN59), dokosaani (P65), 4,4'-(1-metyyli-etylideeni-bisfenoli (P69) ja pentakosaani (P70).

3.3.3 Sinisimpukan ja kolmipiikin rakennemuuttujat

Sinisimpukan (BM; Blue Mussel) keskikasvu mesokosmoksessa oli mitattu vuosina 1995 (BMG95) ja 1996 (BMG96). Kolmipiikille (SB; StickleBack) oli mitattu seuraavat rakennemuuttujat:

SBMORT = Kuolleisuus
 SBJUV96 = Poikasten määrä vuonna 1996
 SBJUVG95 = Poikasten kasvu vuonna 1995
 SBJUVG96 = Poikasten kasvu vuonna 1996

Näiden rakennemuuttujien (taulukko 11) keskinäiset korrelaatiot eivät ole merkitseviä (taulukko 12), eivätkä edes erityisen voimakkaita ($|R| < 0.57$).

TAULUKKO 11. Sinisimpukan (BM) ja kolmipiikin (SB) rakennemuuttujien lukuarvot mesokosmostuloksissa.

Näyte	BMG95	BMG96	SBMORT	SBJUV96	SBJUVG95	SBJUVG96
SUO	.379	.256	48.00	73.00	.804	.103
KUNTA	.272	.277	53.00	173.00	.758	.097
TCFOLD	.262	.330	75.00	118.00	1.050	.092
TCFOHD	.409	.262	77.00	175.00	.795	.123
TCFBLD	.308	.275	87.00	92.00	.800	.107
TCFBHD	.407	.294	58.00	145.00	.741	.073
ECFOLD	.304	.222	30.00	144.00	.814	.056
ECFOHD	.228	.248	89.00	134.00	.811	.094
ECFBLD	.229	.319	77.00	258.00	.900	.060
ECFBHD	.372	.231	83.00	144.00	.829	.071

TAULUKKO 12. Sinisimpukan ja kolmipiikin rakennemuuttujien keskinäiset kaksisuuntaiset Pearson-korrelaatiot.

	BMG95	BMG96	SBMORT	SBJUV96	SBJUVG95	SBJUVG96
SBMORT	-.2061	.2591	1.0000	.1016	.2574	.3287
BMG95	1.0000	-.3130	-.2061	-.3112	-.4624	.2482
BMG96	-.3130	1.0000	.2591	.3056	.5616	.0360
SBJUV96	-.3112	.3056	.1016	1.0000	.0642	-.4085
SBJUVG95	-.4624	.5616	.2574	.0642	1.0000	-.1253
SBJUVG96	.2482	.0360	.3287	-.4085	-.1253	1.0000

Myöskään rakennemuuttujien korrelaatiot yhdisteryhmien pitoisuuksien kanssa eivät ole merkitseviä, mutta voimakkaita korrelaatioita esiintyy (taulukko 13). Sinisimpukan ja kolmipiikin rakennemuuttujien voimakkaimmat korrelaatiot yksittäisten yhdisteiden pitoisuuksien kanssa ovat taulukossa 14.

TAULUKKO 13. Sinisimpukan ja kolmipiikin rakennemuuttujien voimakaimmat ($R > 0.4$) kaksisuuntaiset Pearson-korrelaatiot yhdisteryhmien pitoisuuksien kanssa.

Ryhmä	BMG95	BMG96	SBMORT	SBJUV96	SBJUVG95	SBJUVG96
ALA	.4226	-.0435	.2551	.1665	-.0571	.5719
AMD	.6080	.2033	.0335	.0141	-.3446	.1733
AMN	-.2066	-.1762	.1168	.1833	-.2391	.4936
E	-.1864	-.3278	.0497	-.0993	-.2538	.5001
EST	-.0033	-.4678	-.0179	-.3717	-.2819	.2561
ETB	.2467	-.1972	-.3046	-.2339	-.2826	.5678
K	.1553	-.3462	-.0479	-.3885	-.2104	.4904
NIT	-.4200	-.3752	.3006	-.0615	-.0936	-.0341
P	-.4479	-.3339	.2570	-.0778	-.0903	.0160
PAD	-.4251	-.3412	.2667	-.0780	-.0992	.0201
PHD	-.4041	-.3985	.3299	-.0443	-.0794	-.0248
S	-.1030	-.3307	-.2346	-.4097	-.2570	.2806
SHC	.4633	-.1225	-.3863	-.4900	-.3989	.2586
STI	-.4439	-.3497	.2719	-.0719	-.0873	.0012
TER	-.4033	-.3226	.2381	-.1015	-.1315	.0194
UHC	.4878	-.3676	.0329	-.1072	-.5774	.4053

TAULUKKO 14. Sinisimpukan ja kolmipiikin rakennemuuttujien voimakaimmat ($|R| > 0.5$) kaksisuuntaiset Pearson-korrelaatiot yksittäisten yhdisteiden kanssa.

	BMG95	BMG96	SBMORT	SBJUV95	SBJUVG95	SBJUVG96
AC10	.5683	-.0820	.3167	.2168	-.0267	.3983
AC14	.4264	-.0042	.2194	.1728	.0168	.5752
AC18	.4471	.0018	.2246	.1794	.0270	.5556
AC22	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AC24	.4182	.0024	.2124	.1703	.0206	.5807
AC25	.2095	.0552	.0012	.2623	-.1512	.6034
AC26	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AC27	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AC30	.4068	.0127	.2014	.1658	.0274	.5880
AC32	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AC50	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AC52	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AC67	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AN13	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AN15	-.5396	-.2669	.0645	.0310	-.2495	.0923
AN19	.3276	-.0498	-.2853	-.0984	-.2389	.6588*
AN21	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AN30	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AN31	.1370	.0600	-.0541	.2694	-.1925	.5608
AN37	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AN39	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
AN40	.2271	.0537	.0154	.2591	-.1398	.6113
AN63	.4615	-.0685	.2092	.2014	-.0118	.5557
AN81	.5383	.0920	.1643	.1428	-.0773	.5381
AN82	.1988	-.3880	.5174	.1856	.0068	.2126
AN84	.1447	-.4195	.5174	.1941	-.0396	.1804
AN86	.0951	-.4573	.5038	.1967	-.0400	.1084

TAULUKKO 14 (jatkoa).

Yhdiste	BMG95	BMG96	SBMORT	SBJUV95	SBJUVG95	SBJUVG96
AN88	.2762	-.3853	.0638	-.0214	-.5867	.2305
AN89	.3070	-.4156	.0272	-.0923	-.5782	.2408
N1	.1705	-.1488	-.1649	-.0622	-.2733	.7040*
N12	-.5412	-.2881	.1103	.0113	-.2211	.0729
N13	.5697	-.0712	-.3371	-.4825	-.2198	.3569
N15	.4096	.0217	.1916	.1607	.0341	.5901
N19	.6620*	.1745	.0809	.0694	-.2359	.3905
N2	.2467	-.1972	-.3046	-.2339	-.2826	.5678
N21	.4768	.0341	.1631	.1252	-.0070	.5998
N23	.6729*	.1849	.0625	.0522	-.2599	.3583
N32	.4464	.0052	.1545	.1075	.0230	.6215
N33	.6656*	.1971	.0572	.0526	-.2752	.3182
N34	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
N39P6	.5505	.1097	.1444	.0518	-.2913	.3448
N44	.6507*	.2162	.0379	.0420	-.3053	.2394
N47AN3	.2070	-.3794	-.1397	-.5010	-.1789	.1803
N48	.6544*	.1955	.0717	.0695	-.2627	.3266
N49	.6533*	.1918	.0767	.0735	-.2556	.3392
N53	.6362*	.2277	.0121	.0208	-.3314	.1703
N54	.6231	.2328	-.0032	.0081	-.3444	.1283
N58	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
N6	.3502	-.2361	-.1859	-.4379	-.1122	.5063
N62	.4041	.0215	.1962	.1650	.0346	.5874
N63AN2	.1215	-.1627	.3185	.1073	-.0173	.5443
N64AC11	.6736*	.0874	-.1659	-.2637	-.4726	.2068
N65	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
N7	.1387	-.2706	-.2594	-.5222	-.1350	.2446
N76	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
N78	.6550*	.2057	.0564	.0571	-.2832	.2877
N80	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
N81	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
N83	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
N87	.2244	-.1149	.2977	.1340	.0003	.5735
N9	.0816	-.0305	-.2980	.0253	-.3077	.5278
P2	.2870	-.1726	-.3442	-.5093	-.1109	.2499
P27	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
P30	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
P34	.4061	.0232	.1948	.1653	.0350	.5869
P38AC46	.4626	-.1132	.2600	.1740	-.1522	.5719
P58	.4337	-.0137	.2346	.1847	.0416	.5510
P74AN85	.1561	-.5008	.3354	.0837	-.3561	.1513
P8	.0682	.3911	.4050	.3258	.6563*	.1786

Taulukosta 14 havaitaan, että vaikutusten ja yksittäisten yhdisteiden välillä esiintyy vain muutama jokseenkin merkitsevä ($p < 0.05$) korrelaatio. Sinisimpukan ensimmäisen vuoden kasvua (BMG95) näyttävät edistävän myös biologista puhdistusta kestävät TCF-veden (jotkut myös suoveden) yhdisteet: haarautunut undekaani (N19), 3-butyyl-2,4-pentaanidioni (N23), oktyylisykloheksaani (N33), 1,3-dimetyyli-butyylisykloheksaani (N44), 3-butyylipentaanidioli (N48), 7-pentyylisykloheksaani (N49), N,N-dibutyyliformamidi (N53) ja 3,4,5-trimetoksi-asetofenoni (N78).

Myös biologisessa käsittelyssä helposti hajoava 2,6-bis-(dimetyylietyyli-2,5-sykloheksadieeni-1,4-dioni (N64AC11; = 2,6-di-t-butyli-p-bentso-kinoni) korreloi jokseenkin merkitsevän positiivisesti sinisimpukan vuoden 1995 kasvun kanssa.

Kolmipiikin poikasten ensimmäisen vuoden kasvua (SBJUVG95) näyttää jokseenkin merkitsevästi stimuloivan heptenyyli-2,5-sykloheksaani (P8), ja toisen vuoden kasvua (SBJUVG96) dibutyylieetteri (N1), 3,4,5-trimetoksiasetofenoni (N78) sekä pentadekaani (AN19).

3.3.4 Sedimentin eliöiden biomassa

Vertailtavina vaikutusmuuttujina olivat mesokosmoksen sedimentin seitsemän eliölajin biomassat (Taulukko 15):

CARDI = <i>Cardium</i>	MACOM = <i>Macoma</i>
DNDRO = <i>Dendrocoelum</i>	POLYC = <i>Polychaeta</i>
HYDRO = <i>Hydrobia</i>	THEOD = <i>Theodoxus</i>
LYMNE = <i>Lymnea</i>	YHTG = kokonaisbiomassa

TAULUKKO 15. Sedimentin eliötulosten lukuarvot.

Näyte	YHTG	MACOM	LYMNE	CARDI	DNDRO	HYDRO	THEOD	POLYC
SUO	2358.00	951.00	816.00	588.00	1.00	.00	2.00	.00
KUNTA	2445.00	1886.00	470.00	58.00	5.00	19.00	7.00	.00
TCFOLD	1767.00	865.00	95.00	803.00	2.00	2.00	.00	.00
TCFOHD	1666.00	841.00	82.00	739.00	3.00	.00	1.00	.00
TCFBLD	1169.00	934.00	230.00	.00	4.00	.00	1.00	.00
TCFBHD	1470.00	894.00	120.00	447.00	2.00	3.00	3.00	1.00
ECFOLD	2256.00	925.00	188.00	1090.00	3.00	.00	35.00	15.00
ECFOHD	2216.00	829.00	426.00	930.00	3.00	17.00	11.00	.00
ECFBLD	1264.00	757.00	258.00	232.00	4.00	5.00	7.00	1.00
ECFBHD	988.00	917.00	61.00	.00	6.00	4.00	.00	.00

Eliöryhmien biomassatulosten (Taulukko 15) keskinäisistä korrelaatioista (Taulukko 16) oli merkitsevä vain positiivinen THEOD/POLYC^{**}. Jokseenkin merkitseviä olivat positiivinen korrelaatio LYMNE/YHTG^{*} sekä negatiivinen CARDI/DNDRO^{*}. Yhdisteryhmien merkitseviä ($p < 0.01$) positiivisia korrelaatioita (mahdollinen stimulointi) havaittiin (Taulukko 17) aromaattisille hapoille (ARA) itämerensimpukan (*Macoma*) kanssa sekä rikkiyhdisteille (S) limakotilon (*Lymnea*) kanssa.

TAULUKKO 16. Sedimentin eliötulosten keskinäiset kaksisuuntaiset Pearson-korrelaatiot.

	YHTG	MACOM	LYMNE	CARDI	DNDRO	HYDRO	THEOD	POLYC
YHTG	1.000	.4698	.6559*	.5419	-.4102	.4205	.4587	.2953
MACOM	.4698	1.000	.3240	-.3834	.3705	.6184	.0227	-.0828
LYMNE	.6559*	.3240	1.000	.0194	-.3334	.2995	.0119	-.1473
CARDI	.5419	-.3834	.0194	1.000	-.6546*	-.1328	.5451	.5131
DNDRO	-.4102	.3705	-.3334	-.6546*	1.000	.3664	-.0358	-.0808
HYDRO	.4205	.6184	.2995	-.1328	.3664	1.000	.0428	-.2568
THEOD	.4587	.0227	.0119	.5451	-.0358	.0428	1.000	.9414**
POLYC	.2953	-.0828	-.1473	.5131	-.0808	-.2568	.9414**	1.000

TAULUKKO 17. Sedimentin eliötulosten ja yhdisteryhmien väliset voimakkaat ($R > 0.4$) korrelaatiot.

RYHMÄ	YHTG	MACOM	LYMNE	CARDI
ALC	.4360	-.1673	.3163	.5104
ALD	.3198	-.2168	.0956	.5275
AMN	.5267	.4448	.1155	.2601
ARA	.3476	.8282**	.0797	-.2608
E	.6973*	.2314	.4834	.4433
EST	.5593	-.0129	.7183*	.3258
ETB	.6300	.4960	.7424*	.0060
K	.5762	-.1565	.6555*	.5077
PHT	.0918	.6726*	.1151	-.4929
S	.7372*	.2190	.9187**	.2558
SHC	.4123	.1136	.7553*	.0237
TER	.3653	-.1902	.1994	.5027

RYHMÄ	DNDRO	HYDRO	THEOD	POLYC
ALC	-.1541	.5252	.2900	.0313
AMN	.1317	.6757*	.0819	-.1395
ARA	.4898	.6937*	-.0933	-.2345
E	-.1715	.5995	.1168	-.1349
K	-.5532	.1151	-.0267	-.1583
PAD	-.0864	.5322	.3120	.0577
PHD	.0333	.5287	.2791	.0357
PHT	.6661*	.6698*	-.1776	-.2951
RA	-.1145	.5137	.2972	.0482
SHC	-.5658	-.0626	-.2236	-.2276
STI	-.0581	.5411	.3176	.0620

Sedimentin eliöiden biomassamuuttujien voimakkaita korrelaatioita yksittäisiin yhdisteisiin on aineistossa paljon. Ne on koottu taulukkoon 18.

TAULUKKO 18. Yksittäisten yhdisteiden voimakkaat ($R > 0.6$) kaksisuuntaiset Pearson-korrelaatiot sedimentin eliöiden biomassan kanssa.

Yhdiste	YHTG	MACOM	LYMNE	CARDI
AC17	.6870*	.2477	.6023	.3388
AC19	.3414	.8295**	.0716	-.2654
AC3	.6111	.8071**	.3741	-.0799
AC63	.5558	.8952**	.4846	-.2706
AC66	.5330	.8451**	.3308	-.1841
AN22	-.0931	.6592*	-.0243	-.6444*
N1	.6377*	.4925	.4932	.1616
N106	-.0592	.7438*	-.0525	-.6495*
N107P68A	.4700	-.1489	.7885**	.2873
N13	.2897	-.1146	.6324*	.1237
N2	.6300	.4960	.7424*	.0060
N24	.4001	-.0342	.8095**	.0945
N3	.4475	.9835**	.2886	-.3793
N4	.7209*	.3071	.9633**	.1410
N47AN3	.3927	-.1804	.7654**	.2222
N6	.4629	-.1612	.6887*	.3513
N68	.3614	-.2066	.1479	.5415
N7	.5189	-.0944	.8624**	.2626
N70	.5073	.7860**	.4850	-.2405
N9	.5985	.8143**	.4877	-.1491
P10	-.6378*	-.1692	-.4335	-.4439
P11AN15	.3857	-.0167	.7940**	.0715
P16	.5404	-.2449	.5243	.6007
P2	.4162	-.0417	.8206**	.1146
P22AN33	.6234	.5919	.3523	.1206
P35AN43	.6721*	.7289*	.4950	-.0058
P36	.3785	-.0460	.7826**	.0925
P4	.4993	.0290	.8391**	.1539
P41AN48	.3914	-.0473	.7809**	.1118
P47	.5999	.8479**	.3694	-.1239
P5	.4634	.0713	.7250*	.1378
P50AN52	.6870*	.3874	.8957**	.0737
P53	-.6477*	-.1441	-.3875	-.5075
P55	.4169	-.0416	.8210**	.1152
P56	.3850	-.0652	.7459*	.1395
P62AN59	.3903	-.0439	.7887**	.1027
P65	.4583	.0268	.8506**	.0966
P69	.4503	-.0624	.8400**	.1635
P71AN80	-.4595	.2620	-.3095	-.6328*
AC12	.3187	.8394**	.1084	-.1515
AC13	.6231	.1966	-.2185	-.2105
AC17	-.0985	.7379*	.2673	-.0311
AC19	.4968	.6954*	-.0910	-.2318

TAULUKKO 18 (jatkoa).

Yhdiste	DNDRO	HYDRO	THEOD	POLYC
AC3	.3209	.9294**	.1877	-.0779
AC66	.2313	.8588**	.0955	-.1253
AC68	.0321	.6192	.1008	-.1466
AN15	.1513	.8902**	.3009	-.0111
AN22	.8118**	.4891	-.1599	-.2016
AN42	.6174	.5186	-.2693	-.3223
AN46	.6328*	-.0730	-.3391	-.2413
AN47	-.0199	.7664**	.2395	-.0288
AN55	.7422*	.0667	-.2209	-.1607
AN88	.2414	.6308	-.2215	-.3765
N106	.7533*	.5134	-.2039	-.2421
N109AN79	.0315	.1078	.6364*	.5375
N111	.7999**	.4556	-.1288	-.1892
N12	.1086	.8437**	.3181	.0080
N13	-.6690*	-.3746	-.2746	-.1962
N3	.4044	.6929*	.0085	-.1283
N57	.6692*	-.0496	-.2207	-.1381
N6	-.6106	-.2061	-.1601	-.1717
N84	.6692*	-.0496	-.2207	-.1381
N92	.6692*	-.0496	-.2207	-.1381
P12	-.2818	-.1199	-.2254	-.2255
P18	.0987	.8325**	.3207	.0116
P21	-.1437	.6297	.2111	-.0638
P22AN33	.2260	.9313**	.2510	-.0502
P31	.1198	.8557**	.3149	.0040
P33	.1751	.9059**	.2942	-.0166
P35AN43	.2496	.9232**	.1692	-.1128
P44	.0557	.7786**	.3296	.0266
P45	.6692*	-.0496	-.2207	-.1381
P47	.3384	.9134**	.1658	-.0865
P53	.6063	-.0876	-.2633	-.1591

Korrelaatioiden perusteella merkitseviä itämerensimpukan (*Macoma*) kasvun edistäjiä (stimulaattoreita) ovat bentsoehappo (AC19), N-etyylianiiliini (AC3), jokin ftalaatti (AC63), öljyhappo (AC66), 1,3-bismetyyleeni-syklopentaani (N3), 1-metyyli-4-(metyylietyyli)-1,2-sykloheksaani- dioli (N70), jokin oktadieeni (N9) sekä 5-etyylioktadekaani (P47).

Lymnean kasvun kanssa korreloi merkitsevän positiivisesti 15 ainetta:

N107P68AN68	trikosaani	N24	2-fenyylietanoli
N47AN3	bentsotiatsoli	N7	3-hekseeni2-oni
P11AN15AC9	tetradekaani	N4	2-metyyli2-pentaanitioli
P2	4-metyylipentyylisykloheksaani	P36	bentsoehappojohdos
P41AN48	nonadekaani	P4	glyserolidiasetaatti
P50AN52	eikosaani	P65	dokosaani
P62AN59	unkosaani	P69	4,4'-(1-metylideeni)-bisfenoli
P55	2-hydroksi-3-(3-metyyli-1-butenyyli)-naftaleenidioni		

Lattanan (*Dendrocoleum*) kasvua edistivät merkitsevästi korrelaatioiden perusteella heksadekaani (AN22) ja jokin ftalaatti (N111).

Hydrobian kanssa korreloi positiivisen merkitsevästi 13 yhdistettä:

AC12	heptaanihappo	AC3	N-etyylianiiliini
AC66	öljyhappo	AN15	tetradekaani
AN47	jokin ftalaatti	P18	alkyyliisykloheksyylijohdos
P22AN33	heksadekaani	P31	haarautunut oktadekaani
P33	3-metyyliheptadekaani	P44	7-butyliheksadekaani
P35AN43	oktadekaani	P47	5-etyylioktadekaani
N12	2,3-dimetyyli-2-syklopenteeni-1-oni		

3.3.5 Rakkolevän eliöyhteisön biomassa

Riittävästi mittaustuloksia oli saatu mesokosmoksen rakkoleväyhteisön eliöistä *Mytilus*, *Lymnea*, *Theodoxus* ja *Gammarus*. Näiden sekä eliöiden yhteiskasvun (RAKYHTG) ja viimeksimainitun sekä itse levän massan summan (RAKLML) tulokset eri näytteissä on koottu taulukkoon 19.

TAULUKKO 19. Rakkoleväyhteisön eliöiden biomassojen lukuarvot.

	MYTILUS	LYMNEA	THEODOXU	GAMMARUS	RAKYHTG	RAKLML
SUO	6.0	101.0	15.0	1.0	123.5	2300
KUNTA	22.0	81.0	36.0	14.0	154.0	2344
TCFOLD	19.5	18.0	29.0	11.0	77.5	2430
TCFOHD	6.0	17.5	22.0	2.0	47.5	1104
TCFBLD	23.5	38.2	37.0	2.0	100.8	3068
TCFBHD	28.0	22.0	25.5	0.0	79.5	1472
ECFOLD	19.5	53.5	33.0	13.0	119.1	3090
ECFOHD	17.0	34.0	31.0	3.0	85.0	2535
ECFBLD	18.0	29.5	36.0	13.0	96.5	2770
ECFBHD	10.0	22.0	27.0	2.0	61.0	2015

Taulukossa 20 esitetään yllä mainittujen muuttujien keskinäiset korrelaatiot. Merkitsevästi korreloivat vain LYMNEA/RAKYHTG** ja jokseenkin merkitsevästi MYTILUS/THEODOXUS*.

Taulukkoon 21 on koottu voimakkaat rakkoleväyhteisön muuttujien ja yhdisteryhmien pitoisuuksien korrelaatiot.

TAULUKKO 20. Rakkolevâyhteisön muuttujien keskinäiset korrelaatiot

	MYTILUS	LYMNEA	THEODOXUS	GAMMARUS	RAKYHTG
MYTILUS	1.000	-.1751	.6647*	.2891	.2983
LYMNEA	-.1751	1.000	-.1990	.1521	.8467**
THEODOXUS	.6647*	-.1990	1.000	.6036	.3025
GAMMARUS	.2891	.1521	.6036	1.000	.5126
RAKYHTG	.2983	.8467**	.3025	.5126	1.000
RAKKOLML	.3284	.2947	.6219	.5036	.5574

TAULUKKO 21. Voimakkaat ($|R| > 0.5$) korrelaatiot rakkolevâyhteisön eliöiden biomassan ja yhdisteryhmien pitoisuuksien kesken.

	MYTILUS	LYMNEA	THEODOXUS	GAMMARUS	RAKYHTG	RAKKOLML
ALA	-.4645	-.4195	-.3706	-.2842	-.6278	-.7247*
AMD	.2695	-.4448	-.2929	-.5094	-.4685	-.7096*
ETB	-.5777	.7474*	-.5495	-.0869	.3991	-.2853
K	-.5903	.4071	-.6605*	-.4356	-.0027	-.2213
S	-.3537	.7530*	-.4058	-.1639	.4744	.1167
SHC	-.2599	.6710*	-.7198*	-.4711	.3161	-.2571
UHC	-.4038	.1973	-.5622	-.5167	-.1242	-.7210*

Vain jokseenkin merkitseviä korrelaatioita esiintyy taulukossa 21: niiden perusteella *Lymnean* kasvua edistivät etyylibentseeni, rikkiyhdisteet ja tyydyttyneet hiilivedyt. Jälkimmäiset, kuten ketonitkin, sen sijaan esiintyvät *Theodoxuksen* kasvun estäjinä. Inhibiittoreita yhteisön koko biomassan, rakkolevä mukaan luettuna, kasvuille olisivat alifaattiset karboksyylihapot ja amidit. Yksittäisten yhdisteiden pitoisuuksien voimakkaimmat korrelaatiot rakkolevâyhteisön vaikutusmuuttujien kanssa on koottu taulukkoon 22.

TAULUKKO 22. Rakkolevâyhteisön vaikutusmuuttujien ja yksittäisten yhdisteiden pitoisuuksien voimakkaat ($|R| > 0.6$) kaksisuuntaiset Pearson-korrelaatiot.

	MYTILUS	LYMNEA	THEODOXUS	GAMMARUS	RAKYHTG	RAKKOLML
AC1	.2079	-.2110	-.1452	-.2658	-.2000	-.7210*
AC10	-.5310	-.5192	-.3958	-.3426	-.7495*	-.7778**
AC14	-.5131	-.3790	-.3715	-.2173	-.5933	-.6798*
AC18	-.5155	-.3979	-.3740	-.2230	-.6124	-.6862*
AC2	.2643	-.4245	-.2268	-.4959	-.4354	-.7354*
AC22	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC24	-.5085	-.3708	-.3679	-.2087	-.5825	-.6712*
AC26	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC27	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC30	-.5021	-.3585	-.3634	-.1963	-.5668	-.6575*
AC32	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC36	-.1209	-.4643	-.4107	-.4633	-.6085	-.8761**

TAULUKKO 22 (jatkoa 1).

	MYTILUS	LYMNEA	THEODOXUS	GAMMARUS	RAKYHTG	RAKKOLML
AC37	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC42	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC45	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC48	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC5	-.2457	-.5627	-.3477	-.4799	-.7270*	-.7461*
AC50	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC52	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC54	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC56	-.3530	-.3407	-.3372	-.2039	-.5032	-.7416*
AC58	-.4992	-.3630	-.3554	-.1965	-.5689	-.6434*
AC59	.5883	-.2510	-.1044	-.4187	-.1525	-.3786
AC6	.2333	-.4987	-.2295	-.5603	-.5256	-.6547*
AC65	-.4900	-.3460	-.3546	-.1812	-.5475	-.6553*
AC67	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AC8	-.3509	-.6027	-.3718	-.4686	-.7913**	-.8625**
AN13	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AN21	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AN30	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AN37	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AN39	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
AN41	-.5574	-.0812	-.2410	-.0273	-.2712	-.6260
AN45	-.0187	-.0171	-.3425	-.5672	-.1776	-.5164
AN63	-.6105	-.2907	-.3865	-.1832	-.5352	-.7037*
AN70	-.6174	-.4661	-.2206	-.2588	-.6779*	-.5293
AN73	-.6253	-.4472	-.3363	-.2308	-.6797*	-.6766*
AN78	-.2903	-.0319	-.4608	-.4057	-.2577	-.7957**
AN81	-.3252	-.4319	-.3927	-.3132	-.6088	-.7651**
AN82	-.5996	-.5187	-.2410	-.3333	-.7403*	-.4854
AN84	-.5507	-.4853	-.1877	-.3110	-.6817*	-.4572
AN86	-.5510	-.4151	-.1421	-.2611	-.6001	-.3824
N107P68A	-.6573*	.6031	-.7364*	-.4154	.1450	-.0697
N15	-.5025	-.3497	-.3677	-.1920	-.5591	-.6515*
N19	-.0378	-.4510	-.4046	-.4602	-.5728	-.8162**
N2	-.5777	.7474*	-.5495	-.0869	.3991	-.2853
N21	-.4892	-.3338	-.4276	-.2531	-.5629	-.6983*
N23	.0107	-.4415	-.4031	-.4791	-.5535	-.8096**
N24	-.5206	.7302*	-.7080*	-.3101	.3234	-.0038
N25	.2573	-.4195	-.3116	-.4995	-.4506	-.7160*
N3	.2379	.4824	.3431	.4762	.6612*	.0164
N32	-.5628	-.2732	-.4473	-.2268	-.5283	-.6573*
N33	.0703	-.4522	-.3746	-.4809	-.5413	-.7952**
N34	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
N39P6	.0582	-.5034	-.3396	-.5073	-.5904	-.7689**
N4	-.3729	.8568**	-.4590	-.1328	.5595	.0929
N44	.1782	-.4528	-.3290	-.4864	-.5038	-.7579*
N48	.0598	-.4698	-.3612	-.4665	-.5551	-.7970**
N49	.0415	-.4712	-.3653	-.4623	-.5616	-.8010**
N52	.3472	-.4029	-.2627	-.4902	-.3994	-.6584*
N53	.2628	-.4320	-.2990	-.4922	-.4566	-.7152*
N54	.3108	-.4165	-.2792	-.4922	-.4254	-.6848*
N58	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
N6	-.7218*	.5310	-.8134**	-.4150	.0477	-.2388
N60	-.1337	-.4692	-.3916	-.4071	-.6045	-.8125**
N62	-.4971	-.3569	-.3600	-.1894	-.5622	-.6501*
N64AC11	.1303	-.0112	-.5715	-.6540*	-.1945	-.6292
N65	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
N7	-.5010	.6930*	-.6484*	-.3399	.2995	.0680
N76	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
N77	.3500	-.3412	.0163	-.4608	-.2890	-.1541

TAULUKKO 22 (jatkoa 2).

	MYTILUS	LYMNEA	THEODOXU	GAMMARUS	RAKYHTG	RAKKOLML
N78	.1144	-.4636	-.3477	-.4773	-.5335	-.7819**
N8	-.4547	-.0241	-.3010	-.0180	-.2042	-.6256
N80	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
N81	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
N83	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
N86	.3768	-.2734	-.1729	-.3456	-.2281	-.7034*
N9	-.2367	.6083	-.1520	.2147	.5009	-.2754
P11AN15	-.4402	.7173*	-.7284*	-.3646	.3215	-.0702
P12	-.5861	.3929	-.7564*	-.6141	-.0612	-.2058
P26	-.6311	-.4853	-.3084	-.2727	-.7178*	-.5896
P27	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
P30	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
P34	-.4969	-.3563	-.3604	-.1888	-.5615	-.6506*
P36	-.5653	.7072*	-.7397*	-.3273	.2812	-.0515
P38AC46	-.4933	-.3717	-.3972	-.3208	-.6020	-.7947**
P4	-.6594*	.7121*	-.7222*	-.3432	.2606	-.0888
P40AN44	-.4871	-.3959	-.2799	-.2022	-.5756	-.7598*
P41AN48	-.5685	.7038*	-.7464*	-.3272	.2760	-.0651
P43	-.9065**	.2289	-.6787*	-.3320	-.2293	-.5605
P5	-.5170	.5494	-.7369*	-.5464	.1177	-.3437
P50AN52	-.5164	.8141**	-.5270	-.1632	.4650	-.0897
P55	-.5216	.7304*	-.7054*	-.3157	.3226	.0048
P56	-.6186	.6673*	-.7826**	-.3462	.2189	-.1311
P58	-.5416	-.3935	-.3695	-.2109	-.6128	-.6723*
P62AN59	-.5850	.7001*	-.7605*	-.3597	.2599	-.0857
P65	-.5096	.7691**	-.6855*	-.2865	.3705	.0062
P69	-.5290	.7222*	-.6992*	-.3312	.3110	.0196
P70	-.8667**	.4663	-.8278**	-.4667	-.0610	-.2912
P8	-.4101	-.5960	-.1722	.1056	-.6690*	-.4048

Merkitseviä positiivisia, stimulaatioon viittavia korrelaatioita havaittiin *Lymnean* biomassalle ja 2-metyyli-2-pentaanitiolille (N4), eikosaanille (P50AN52) sekä dokosaanille (P65).

Merkitseviä negatiivisia mahdollisesta inhibiittorista kertovia korrelaatioita havaittiin *Mytilukselle* haarautuneen eikosaanin (P43) sekä pentakosaanin (P70) kanssa ja *Theodoxukselle* 4-metyyli-2-pentanonin (N6), (asetyyli-dihydroksi-dimetyyli-bentsofuranyyli)-pentaanidionin (P56) sekä pentakosaanin (P70) kanssa.

Rakkolevän eliöiden kokonaisbiomassaa näytti merkitsevästi inhiboivan pentaanihappo (AC8). Koko systeemin massan (rakkolevä mukaanluetuna) kanssa korreloi merkitsevästi negatiivisesti 12 yhdistettä:

AC10	heksaanihappo	AC36	dodekaanihappo
AN78	tetrakosaani	AN81	pentakosaanijohdos
N19	haarautunut undekaani	N23	3-butyli-2,4-pentaanidioni
N23	oktyylisykloheksaani	N39P6	1-metyylipentyyli-2,4-pentaanidioni
N48	3-butyylipentaanidioni	N49	7-pentyyli-bisyyliheksaani
N60	sykloheksaani-2,4,6-trimetoksi-asetofenoni	N78	3,4,5-trimetoksi-asetofenoni

3.4 Suo- ja kuntavesien tilastotuloksista

Suo- ja kuntavesistä analysoitiin vain ne yhdisteet, jotka tunnistettiin tehdasvesistä. Tämä selittää suurelta osin näiden näytteiden pistearvojen erilaisuuden tehdasvesiin verrattuna. Esimerkiksi suo- ja kuntaveden selvä yhteys altistettujen kalojen veriarvoihin (HCT, HB ja MCHC) johtunee osittain muista, tutkimuksen ulkopuolelle jätetyistä komponenteista.

4. POHDINTA ja JOHTOPÄÄTÖKSET

GC/MS:lla rekisteröidyt 323 orgaanista yhdistettä ryhmiteltiin 22 ryhmään, joiden pitoisuusvaihtelua verrattiin vaikutusmuuttujien vaihteluun lineaarisella regressiolla (kaksisuuntaiset Pearson korrelaatiot). Kuorimovedellä, jonka kemiallinen analyysi tarjosi hyvän vertailuaineiston tehdasvesille (Kuva 1, s.18), ei valitettavasti oltu tehty vaikutustutkimuksia. Yhdisteryhmien keskinäiset pitoisuussuhteet olivat TCF- ja ECF-vesissä hyvin erilaiset. Käsittelemättömässä TCF-jätevedessä vallitsiva alifaattiset karboksyylihapot. Seuraavat ryhmät: hartsihapot ja hiilivedyt, olivat jo kertaluokkaa pienempiä. Käsittelemätön ECF-vesi sisälsi ryhmiä järjestyksessä hartsihapot > alifaattiset karboksyylihapot > hiilivedyt ja fenolit. Kuorimoveden ryhmien suhteet olivat mutten samantaisia kuin ECF-vedessä, mutta kuorimovedessä fenolien osuus oli kertaluokkaa suurempi ja hartsihappoja oli suhteellisesti vähemmän.

Käytetty tilastometodiikka perustuu aineiston luonteeseen. Selitettävät muuttujat ovat vaikutuksia ilmaistuna biotestien tuloksena annettuna lukuna. Selittäjät ovat yhdisteiden pitoisuuksia, jotka on laskettu jakamalla GC/MS-piikin intensiteetti sisäisen standardin (ISTD) piikin intensiteetillä ja kertomalla ISTD:n pitoisuudella ($\mu\text{g/L}$). Kun selittävien muuttujien laatu (dimensio) on kaikilla sama, pätevä monimuuttujanalyysi voidaan tehdä ilman muuttujien normalisointia. Näytteiden lukumäärä on akuuttivaikutusten tapauksessa kuusi ja kroonisten vaikutusten tutkimustuloksissa kymmenen. Jälkimmäisessä kutakin tehdasvettä käytettiin kahdessa laimennuksessa. Tilastokäsittelyssä aineiden pitoisuusluvuiksi otettiin 2000-kertaa laimennetuille näytteille alkuperäiset $\mu\text{g/L}$ -arvot, 400-kertaisille laimennuksille alkuperäiset arvot kerrottuna viidellä, jolloin pitoisuuksien suhteet vastaavat todellisia koevesien ainemääriä ja niitä voidaan pätevästi verrata 10 näytteen toisistaan riippumattomiin mesokosmosvaikutuksiin.

Tehdyt vertailut tuottivat joukon merkitseviä korrelaatioita eri vaikutusten ja yhdisteiden pitoisuuksien kesken antaen viitteitä mahdollisista myrkyistä, inhibiittoreista ja stimulaattoreista. Lisäksi määritetyt korrelaatiot muodostavat lähtökohdan monimuuttuja-analyysille (eri raportti), joilla saadaan tarkistettua viitteet mahdollisista ekotoksisia vaikutuksia aiheuttavista päästöaineista. Tulosten avulla malliyhdisteiden hankinta tai synteesi rakenteen lopullista todistamista varten sekä saaminen malliaineiksi analytiikkaan ja ekotoksisuustutkimuksiin voidaan suunnitella tehokkaasti.

5. KIRJALLISUUSLUETTELO

- Lee, B.H., T.E. Peart ja J.M. Carron 1990. Gas chromatographic and mass spectrometric determination of some resin and fatty acids in pulpmill effluents as their pentafluoro benzyl ester derivatives. *J. Chromatogr.* **498**: 367-379.
- Mikkelsen, P., J. Paasivirta, L.H. Rogers ja M. Ikonomou (1996). Studies on eulachon tainting problem: Analyses of tainting and toxic aromatic pollutants. Kirjassa: M.R. Servos, K.R. Munkittrick, J.H. Carey ja G.J. Van der Kraak (toim.). *Environmental Fate and Effects of Pulp and Paper Mill Effluents*. St. Lucie Press, Delray Beach, FL. ISBN 1-884015-71-9: 327-333.
- Paasivirta, J. ja P. Mikkelsen (1997). Oxygen and ECF bleaching waste compounds and their contribution to ecotoxic effects. ABSTRACT and proceedings manuscript. *3rd International Conference on Environmental Fate and Effects of Pulp and Paper Mill Effluents*, Rotorua, New Zealand, 10-13 Nov. 1997.
- Paasivirta, J. (toim. 1992). Organochlorines from Pulp Mills and Other Sources. Research Methodology Studies 1988. *Department of Chemistry, University of Jyväskylä Research Report* **38**.
- Paasivirta, J., R. Herzsuh, M. Lahtiperä, J. Pellinen ja S. Sinkkonen (1981). Oil residues in Baltic sediment, mussel and fish. I. Development of the analysis methods. *Chemosphere* **10** : 919-928.
- Paasivirta, J., H. Tenhola, H. Palm ja R. Lammi (1992). Free and bound chlorophenols in kraft pulp mill bleaching effluents. *Chemosphere* **24** : 1253-1258.
- Voss, R.H., J.T. Wearing ja A. Wong (1980). A novel gaschromatographic method for the analysis of chlorinated phenolics in pulp mill effluents. *2nd Chem. Congr. of the North American Continent*, Las Vegas, Nevada, August 1980.
- Voss, R.H., ja A. Rapsomatotis (1985). An improved solvent-extraction based procedure for the gas-chromatographic analysis of resin and fatty acids in pulp mill effluents. *J. Chromatogr.* **346**: 205-214.

LIITE 1. Kemiallinen karakterisointi.

Sample	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
SUO	9.98	3.25	0	54.26	0	41.10	85.05	4.11	7.06	2.88
KUNTA	12.17	2.48	121.1	24.49	0	0	0	12.44	14.88	0
KUORI	5.08	8.21	19.29	34.11	8.41	20.38	62.14	0	0	2.84
TCFO	12.95	1.82	0	0	0	19.03	0	27.15	7.42	0
TCFB	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ECFO	5.93	0.80	0	25.89	0	12.38	31.36	0.51	1.21	0
ECFB	0	0.46	0.79	0	0	0	0	0	0	0

1	Dibutyl ether	N1
2	Ethyl benzene	N2
3	1,3-Bis-methylene cyclopentane	N3
4	2-Methyl 2-pentanethiol	N4
5	2-Methylheptane	N5
6	4-Methyl-2-pentanone	N6
7	3-Hexen-2-one	N7
8	6-Methyl-5-hepten-2-one	N8
9	Octadiene	N9
10	Ethylcyclohexane	N10

Sample	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
SUO	0	0	8.62	0	0.12	0	0	0	0.12	0
KUNTA	0	4.13	0	0	0	0	0	0	0	0
KUORI	8.68	0	0	0	0	1.30	0	8.62	0	0
TCFO	0	0	2.41	0	12.48	3.25	0	0	2.89	0
TCFB	0	0	2.82	0	0	2.28	0	0	2.33	0
ECFO	0	8.29	0	7.91	0	3.92	5.91	7.78	0	7.78
ECFB	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

11	Benzyl alcohol	N11
12	2,3-Dimethyl-2-cyclopenten-1-one	N12
13	Butyl cyclohexane	N13
14	2,3,4-Trimethyl-2-cyclopenten-1-one	N14
15	Nonene	N15
16	Acetophenone	N16
17	Thiophene 3-ethylketone	N17
18	3,4,5-Trimethyl-2-cyclopenten-1-one	N18
19	Undecane, branched	N19
20	Thiophene 2-ethylketone	N20

Sample	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
SUO	0.45	0.40	0.12	1.28	0.12	0	0.12	0	0	0.12
KUNTA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
KUORI	0	0	0	21.50	0	11.97	0	25.16	67.22	0
TCFO	6.40	0	2.08	0	3.77	0	0	0	0	0
TCFB	0.58	0	1.91	0	6.23	0	1.64	0	0	2.56
ECFO	0	1.89	0	0.02	0	0	0	6.94	0	0
ECFB	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0

21	Nonanal	N21
22	1-Methyl-1-(2-methyl-2-propenyl)-cyclopentane	N22
23	3-Butyl-2,4-pentanedione	N23
24	2-Phenylethanol	N24
25	5,6-Dimethyldecane	N25
26	1,3,3-Trimethyl-bicycloheptan-2-ol ((iso)borneol?)	N26
27	Dodecane, branched	N27, P3
28	Methoxymethylphenol	N28, P9
29	6,6-Dimethylbicycloheptan-2-methyl(ene?)-2-ol	N29
30	1,5-Diethyl-2,3-dimethylcyclohexane	N30

Sample	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
SUO	0	0.09	0.12	0	0.12	0.41	0	0	0	0
KUNTA	0	0	0	0	0	0.15	0	0	0	0
KUORI	34.79	7.49	0	0	0	149.8	0	45.50	3.41	0
TCFO	0	0.77	3.81	6.24	0	0	0	0.82	5.91	0
TCFB	0	0	3.92	0	1.74	0	1.74	0	5.62	0
ECFO	3.76	0	0	0	0	14.14	0	6.06	1.96	9.49
ECFB	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

31	4,6,6-Trimethyl bicyclohept-3-en-2-ol	N31
32	Trimethyl bicycloheptanol	N32
33	Octyl cyclohexane	N33
34	Decene	N34
35	Cyclohexane derivative	N35
36	1,7,7,-Trimethyl bicycloheptan-2-ol ((iso)borneol?)	N36
37	Trimethyl bicycloheptenol	N37
38	4-Methyl-1-(1-methylethyl) cyclohexen-1-ol	N38
39	1-Methylpentyl cyclohexane	N39, P6
40	1-(3,4-Dimethylphenyl)-ethanol	N40

Sample	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
SUO	0	0.18	0	0	0	0	3.08	0	0	0
KUNTA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
KUORI	153.7	41.68	14.52	0	100.5	17.16	0	0	0	11.91
TCFO	0	0	0	4.84	0	0	0.25	4.37	3.44	0
TCFB	0	0	0	6.30	0	0	0.36	4.26	3.21	0
ECFO	22.72	0	1.44	0	8.47	0	1.60	0	0	0.74
ECFB	0	0	0	0	0	0	0.83	0	0	0

41	a,a,4-Trimethyl-3-cyclohexene-1-methanol	N41
42	6,6-Dimethyl-bicyclohept-2-ene-2-methanol	N42
43	Trimethyl bicycloheptanol	N43
44	1,3-Dimethylbutyl-cyclohexane	N44
45	4,6,6-Triethyl-bicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-one (D-verbenone)	N45, AN2
46	Undecanal	N46
47	Benzothiazole	N47, AN3
48	3-Butyl-pentanedione	N48
49	7-Pentyl-bicycloheptane	N49
50	Allyl phenol	N50

Sample	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
SUO	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
KUNTA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
KUORI	47.62	19.64	0	0	14.58	0	18.32	18.32	0	19.64
TCFO	0	2.54	3.10	2.67	0	0	0	2.42	0	2.37
TCFB	0	5.49	5.08	5.08	0	0	0	0	0	1.42
ECFO	0.95	0	0	0	0	7.46	0	0	7.25	0
ECFB	0	0	0	0	0	0	0.06	0	0	0

51	2-Propyl phenol	N51
52	Cyclohexane +	N52
53	N,N-Dibutylformamide	N53
54	1,1'-Bicyclohexyl-..	N54
55	3-Phenyl-2-propen-1-ol	N55
56	1,2,3-Trimethoxybenzene	N56, AN9
57	2-Methoxy-4-(1-propenyl)-phenol	N57
58	3,4-Dihydro-naphthalenone	N58
59	Dodecane	N59, P1
60	Cyclohexane +	N60

Sample	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
SUO	0	0	0	3.1	0	0	0	0	0	0.81
KUNTA	0	0	0	0.56	0	0.04	0	0	0	1.33
KUORI	23.63	0	0	25.1	0	0	0	0	0	0
TCFO	0	9.82	3.04	2.59	1.21	0	0	0.18	0	0.66
TCFB	0	0	0	6.1	0	0	0	0	0	0.51
ECFO	0.96	0.05	1.82	1.32	0	1.15	0.90	1.14	2.61	0.13
ECFB	0	0	0	0.24	0	0.31	0	0	0.49	0.17

61	1,2-Dimethoxy-4-(1-propenyl)-benzene	N61
62	6,10-Dimethyl-5,9,undecadien-2-one	N62
63	Dimethyl phthalate	N63, AN20
64	2,6-Bis(dimethylethyl)-2,5-cyclohexadiene-1,4,-dione	N64, AC11
65	2-Methoxy-propylphenol	N65
66	Ethyl-methoxy-chlorophenol	N66, P25
67	Copaene	N67
68	4,4,7a-Trimethyl-5,6,7,7a-tetrahydro-2(4H)-benzofuranone	N68
69	1-(3,4-Dimethoxyphenyl)-ethanone	N69
70	1-Methyl-4-(1-methylethyl)-1,2-cyclohexanediol	N70

Sample	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80
SUO	0	0	0.15	0	0	0	0	0	0	0
KUNTA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
KUORI	0	3.78	6.23	5.26	16.03	0	0	0	56.68	0
TCFO	0	0	0.30	0	0	0.56	0	0.36	0	2.62
TCFB	0	0	0	0	0	0	1.30	0.40	0	0
ECFO	3.77	0.82	1.73	0	1.19	0	1.43	0	1.22	0
ECFB	0	0.09	0	0	0	0	0.62	0	0.05	0

71	Naphthalene derivative	N71
72	Naphthalene derivative	N72
73	Naphthalene derivative	N73
74	Naphthalene derivative	N74
75	Naphthalene derivative	N75
76	3,4,5-Trimethoxybenzaldehyde	N76
77	Tributyl phosphate	N77
78	1-(3,4,5-Trimethoxyphenyl)-ethanone	N78
79	7-Acetyl-2-hydroxy-2-methyl-5-isopropyl-bicyclononane	N79
80	Octadecene, branched	N80

Sample	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90
SUO	0	0.03	0	0	0	0	0	0	0	0
KUNTA	0	0	0	0	0	2.18	0	0	0	0
KUORI	0	4.71	20.59	0	35.08	0	2.31	4.82	3.54	6.11
TCFO	2.34	0	0.52	0	0	3.33	5.56	0.25	0.96	0
TCFB	0	0	0	0	0	6.15	0	0	0	0
ECFO	0	0	0	0	0	0	2.22	3.50	3.86	1.10
ECFB	0	0	0	1.36	0.28	0.26	0.12	0.15	0.27	0.16

81	Phenol derivative	N81
82	Spathulenol derivative	N82
83	Spathulenol (5,7 and 3 rings together + OH + ligands)	N83
84	Phthalate	N84
85	Spathulenol derivative	N85
86	Phthalate	N86
87	Trimethyl pentadecatrienone	N87
88	Trimethyl-methylethyl-cyclotetradecatetraene	N88, AN54 (AN58)
89	Trimethyl-methylethyl-cyclotetradecatriene	N89
90	Anthracene derivative	N90

Sample	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100
SUO	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
KUNTA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
KUORI	0	3.17	18.77	0	0	5.46	0	5.28	6.01	0
TCFO	0	0	2.40	0	0	0	0	1.02	0	0.24
TCFB	0	0	0	0	0	0	0	0.86	0	0
ECFO	1.10	0	14.80	3.26	12.67	5.56	3.55	2.58	7.66	2.73
ECFB	0.03	0.12	0.59	0.16	0	0	0	0.58	1.71	0.66

91	Anthracene derivative	N91
92	Naphthofuranone derivative	N92
93	Naphthofuranone derivative	N93
94	Naphthopyran derivative	N94
95	Isopimaric aldehyde	N95, AN64
96	Phenanthrenecarboxaldehyde derivative	N96
97	Isopimaric aldehyde derivative	N97
98	Tributylacetyl nitrate	N98
99	Dimethyl-methylethyl octahydrophenanthrenecarboxaldehyde	N99
100	Trimethyl hexadecatrienone	N100

Sample	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110
SUO	0	0	0	0	0	0.01	17.55	0	0	0
KUNTA	0	0	0	0	0	2.07	0.24	0	0	0
KUORI	0	0	442.1	56.14	11.29	2.37	0	0	0	8.35
TCFO	0.20	0	353.6	0.18	0	0.29	3.62	0.52	3.56	0
TCFB	0	0	68.0	0	0	0.42	0.09	0	0	0
ECFO	4.50	2.77	1780.	2.66	13.93	0	7.60	5.45	7.39	0
ECFB	0.33	0	28.8	0	0	1.65	2.45	1.84	3.34	0

101	Stilbene derivative	N101
102	Syringol derivative	N102
103	Dehydroabietic acid	N103, AC74
104	Phenanthrenecarboxaldehyde derivative	N104
105	Hexahydro-dimethyl-methylethyl phenanthrenecarboxaldehyde	N105
106	Hexanedioic acid dioctyl ester	N106
107	Tricosane	N107, P68, AN68
108	Retene derivative	N108
109	Pentacosane, branched	N109, AN79
110	Decahydro-dimethyl-methylethyl phenanthrenecarboxaldehyde	N110

Sample	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120
SUO	0	0	0	0	0	0	0	5.53	17.70	11.47
KUNTA	40.43	0	0	0	0	0	0	0	3.07	4.36
KUORI	0.01	0	4.54	0	0	0	2.26	4.10	17.69	16.77
TCFO	0.87	0	0	0	0	0	0	0	3.43	4.45
TCFB	10.48	0	0	0	0	0	0	0.01	0	4.87
ECFO	26.43	5.70	12.89	6.80	9.57	14.24	31.25	0.31	5.68	7.57
ECFB	79.92	0.69	3.93	2.75	3.75	0	3.95	0	3.23	4.68

111	Phtalate	N111
112	Methoxychlor olefin	N112, AN74
113	Hexacosane, branched	N113
114	Hexacosane, branched	N114
115	Hexacosane, branched	N115
116	Hexacosane, branched	N116
117	Trimethyl heneicosanenitrile	N117
118	4-Methylpentyl cyclohexane	P2
119	Propanetriol diacetate I	P4
120	Propanetriol diacetate II	P5

Sample	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130
SUO	0	0	0	705.7	3.65	0	0	2.01	1.64	0
KUNTA	0	0	0	26.92	0	0	0	0	0	0
KUORI	232.3	0	0	2.44	0	0	531.9	0	10.40	29.85
TCFO	0	2.62	0	12.06	0.59	0	0.26	1.77	1.06	3.03
TCFB	0	0	0.91	104.9	1.18	0	0.12	1.58	0	0.95
ECFO	29.66	0	0	16.50	1.67	33.6	0.54	3.62	2.55	4.45
ECFB	0	1.47	0.82	0.35	2.21	0	0	0.78	0	1.16

121	4-Methoxyphenol	P7
122	Heptenyl cyclohexane	P8
123	Dodecenone	P10
124	Tetradecane	P11, AN15, AC9
125	4-Tridecanone	P12
126	Chloroguaiacol	P13, AC28
127	4-(1-methylethyl)-phenol	P14
128	Pentadecene I	P15
129	Pentadecene II	P16
130	Vanillin	P17

Sample	131	132	133	134	135	136	137	138	139	140
SUO	0	0	0	0.34	0	0	0	0	0	0
KUNTA	0.31	0	0	0.35	16.60	0	0.40	0	0	0
KUORI	0	0	62.39	5.45	0	0	0	1127.3	0	0
TCFO	0	0	0	0.33	1.53	1.74	1.13	0.06	0.57	0.17
TCFB	0	0	0.46	0.14	0	0.06	0	0	0	0.05
ECFO	0.66	0.70	0	1.25	17.29	26.81	1.60	0	0	0.69
ECFB	0	0	0	0.10	0	0.12	0.18	0.06	0	0.16

131	Alkyl-cyclohexyl-	P18
132	Phenol derivative	P19
133	4-(3-hydroxy-1-propenyl)-phenol	P20
134	Hexadecene	P21
135	Hexadecane	P22, AN33
136	4-Acetoguaiacol	P23, AN11
137	Dimethoxy benzenemethanol +	P24
138	Phenol derivative	P26
139	2-Ethyl-5-propyl-thiophene	P27
140	Benzoic acid hexyl ester	P28

Sample	141	142	143	144	145	146	147	148	149	150
SUO	0	0	0	0	0	0	2.08	1.90	0	9.5
KUNTA	0	0	0.17	0	0.20	0	9.79	0	0	21.0
KUORI	17.23	0	0	23.88	0	0	1.38	0	1.65	53.4
TCFO	0	0.84	0	0	0	0.41	0.81	0.12	0	98.5
TCFB	0	0	0	0	0	0	0	0	0.02	22.6
ECFO	11.75	0	0.32	0.48	0.28	0	7.55	0	0.78	27.4
ECFB	0	0	0	0.05	0	0	1.03	0.05	0	26.2

141	Guaiacol-p-acetic acid methyl ester	P29
142	Benzoic acid +	P30
143	Octadecane, branched	P31
144	7-Acetyl-2-hydroxy-2-methyl-5-isopropyl bicyclononane	P32
145	3-Methyl heptadecane	P33
146	5-Propylthiophene-2-ethanone	P34
147	Octadecane	P35, AN43
148	Benzoic acid derivative	P36
149	Dimethoxy-p-acetyl-phenol (Acetosyringol)	P37, AN25
150	Tetradecanoic acid	P38, AC46

Sample	151	152	153	154	155	156	157	158	159	160
SUO	0	0	2.03	0	0.42	0	0	0	0	0
KUNTA	0	0.32	0	0	0.22	0.12	0	0	0.20	0
KUORI	0	3.19	0	115.6	0	0	0	0	0	0
TCFO	0	0.96	0.18	0	0.47	0	0	0	0	0
TCFB	0	0.18	0	0	0	0	0	0	0	0
ECFO	6.26	0	0	0.46	0.13	0.34	0	0.30	0.10	1.26
ECFB	0.18	0.59	0	0	0.39	0	0.06	0	0	0.01

151	Methoxy-methylallyl phenol	P39
152	Nonadecane, branched	P40, AN44
153	Nonadecane	P41, AN48
154	N-(Aminocarbonyl)-hydroxy-methoxy-benzeneacetamide	P42
155	Eicosane, branched	P43
156	7-Butyl-hexadecane	P44
157	Phenol derivative	P45
158	Eicosane, branched	P46, AN50
159	5-Ethyl-octadecane	P47
160	2-Methylpentanoic acid anhydride	P48

Sample	161	162	163	164	165	166	167	168	169	170
SUO	0	7.82	0	0	0	0	4.93	0.58	0	0
KUNTA	0	4.65	0	0	0	0	0	0	0	0
KUORI	0	0.38	0	0	0.32	0	0	0	0	1.55
TCFO	0	1.95	0.12	0	0	0.16	0	0.11	0	0.42
TCFB	0	0.26	0	0	0.03	0	0	0	0	0
ECFO	1.56	3.82	0.36	0.20	0	0.68	0.28	0	44.70	0
ECFB	0	1.51	0.03	0.01	0.12	0	0	0	0	0.05

161	Chlorophenol +	P49
162	Eicosane	P50, AN52
163	Dehydroabietin derivative	P51
164	Chlorophenol +	P52
165	Palmitic acid	P53
166	Dehydroabietin	P54
167	2-Hydroxy-3-(3-methyl-1-butenyl)-naphthalenedione	P55
168	(Acetyl-dihydroxy-dimethyl-benzofuranyl)-pentanedione	P56
169	8-Pentadecylamine	P57
170	Eicosane, branched	P58

Sample	171	172	173	174	175	176	177	178	179	180
SUO	0	0	0	17.56	0.14	0	20.70	0	0	0
KUNTA	0	0	0	0.57	0	0	1.51	0	0	0
KUORI	0	0	7.32	0.63	0	0	0.21	0	0	0
TCFO	0	0	1.70	1.85	0	0.39	0.08	0.08	0.11	0.04
TCFB	0	0	0	0.65	0	0	0.03	0	0	0
ECFO	2.33	4.99	6.90	1.22	2.27	1.11	1.52	0.40	0.50	0.79
ECFB	0	0	0	1.26	0.06	0	0.04	0	0.01	0.05

171	Chlorophenol +	P59
172	Hexanoic acid anhydride	P60
173	Decahydro-3a,6,6,9a-tetramethyl-naphthofuran-2(1H)-one	P61
174	Uncosane	P62, AN59
175	Eicosane derivative	P63
176	Tetrahydro-6-tridecyl-2H-pyran-2-one	P64
177	Docosane	P65
178	Resin acid	P66
179	Resin acid	P67
180	4,4'-(1-methylethylidene)-bisphenol	P69

Sample	181	182	183	184	185	186	187	188	189	190
SUO	6.08	0	0	0	4.17	0	0.00	0.00	0.00	0.00
KUNTA	0.49	0.06	0	0	7.49	0	0.00	0.00	0.10	0.00
KUORI	0.27	0	0	0	3.98	47.27	0.00	4.00	4.60	1.11
TCFO	2.88	0	0.24	0.29	8.53	0	0.00	0.00	0.00	0.00
TCFB	0	0.10	0	0.01	5.04	0	0.00	0.00	0.00	0.00
ECFO	2.10	0	1.54	0.93	12.02	0.19	14.70	1.60	1.90	0.00
ECFB	2.56	0.11	0	0.04	12.12	0	0.00	0.00	0.00	0.00

181	Pentacosane	P70
182	Phthalate	P71, AN80
183	Dehydroabietic acid	P72
184	Hexacosane, branched	P73
185	Hexacosane	P74, AN85
186	Phenol derivative	P75
187	Dodecanal	AN1
188	2,3-Dimethoxytoluene	AN4
189	2-Butanone, 3-phenyl-	AN5
190	2-Cyclohexen-1-one, 3-methyl-6-(1-methylethyl)-	AN6

Sample	191	192	193	194	195	196	197	198	199	200
SUO	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.00	0.20
KUNTA	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	6.50	0.00	0.00	0.00	0.20
KUORI	8.60	1.81	0.00	0.00	0.00	0.00	50.00	0.00	0.00	0.00
TCFO	0.00	0.00	0.00	0.90	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.20
TCFB	0.00	0.00	0.00	0.00	0.70	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
ECFO	0.00	0.00	2.10	0.00	0.00	10.01	1.70	1.70	2.82	0.00
ECFB	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

191	Benzylidenemalonaldehide	AN7
192	Benzene, 1,2,3-trimethoxy-5-methyl-	AN10
193	Cl-phenol, trimethyl-	AN12
194	2-octenal, 2-butyl-	AN13
195	1(2H)-naphthalenone, 3,4-dihydro-	AN14
196	Tetradecane	AN15
197	Benzene, 1,2-dimethoxy-4-(2-propenyl)-	AN16
198	Cyclohexane, ethyl-pentyl-	AN17
199	Chlorophenol, methoxy-ethyl-methyl-	AN18
200	Pentadecane	AN19

Sample	201	202	203	204	205	206	207	208	209	210
SUO	0.00	0.00	2.80	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
KUNTA	0.00	0.20	0.50	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40
KUORI	0.00	0.00	7.30	7.50	0.00	1.50	0.00	0.00	0.00	0.00
TCFO	0.40	0.00	0.50	0.30	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.40
TCFB	0.00	0.00	0.80	0.40	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
ECFO	0.00	0.00	6.44	2.20	1.80	0.00	1.60	1.80	0.00	0.00
ECFB	0.00	0.20	0.60	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

201	Undecene, 6-propyl-	AN21
202	Hexadecane	AN22
203	2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-	AN23
204	Naphthalene +	AN24
205	Chloroguaiacol, 4-ethenyl-	AN26
206	Benzene, 1,2-dimethoxy-4-(2-propenyl)-	AN27
207	1-Naphthalene, hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-	AN28
208	Benzene, dimethoxy +	AN29
209	Hexanal, 2-(phenylmethylene)-	AN30
210	Thiophene +	AN31

Sample	211	212	213	214	215	216	217	218	219	220
SUO	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	0.00
KUNTA	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.40	0.80
KUORI	1.90	10.9	16.5	5.60	0.00	0.70	0.00	0.00	0.00	0.00
TCFO	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.00	0.20	0.60	0.60	0.50
TCFB	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.50
ECFO	0.00	0.60	0.60	1.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.30
ECFB	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.70

211	Octane, 2-methyl-2-phenyl-	AN32
212	Naphthalene, hexahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-	AN34
213	1-Naphthalenol, octahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-	AN35
214	1-Naphthalenol, octahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-	AN36
215	Hexadecene, branched	AN37
216	Benzene, 1-ethoxy-3-((1-methyl-ethylidene)cyclopropyl)-	AN38
217	Naphthalene derivative	AN39
218	Octadecane, branched	AN40
219	Hexadecenal, branched	AN41
220	Hexadecanal	AN42

Sample	221	222	223	224	225	226	227	228	229	230
SUO	0.70	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.70	0.00	0.00
KUNTA	0.70	0.10	0.10	0.00	0.00	0.00	0.10	0.50	0.00	0.00
KUORI	1.50	0.00	1.10	0.00	29.0	0.00	0.70	1.10	0.00	0.90
TCFO	0.40	0.30	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.00	0.00
TCFB	1.30	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.70	0.00	0.00
ECFO	0.80	0.00	0.20	1.50	6.70	3.90	0.00	0.90	1.60	1.00
ECFB	1.30	0.50	0.00	0.80	0.00	0.00	0.60	0.40	0.00	0.00

221	Myristic acid	AN45
222	Nonadecene	AN46
223	P, phthalate	AN47
224	Naphthalenepropanol, ethenyl-decahydro-tetramethyl-methylene-	AN49
225	P, phthalate	AN51
226	Naphthopyran, ethenyldodeca-hydro-pentamethyl-	AN53
227	Uncosene, branched	AN55
228	Nonadecanal	AN56
229	Phenanthrene, octahydro-trimethyl-(methylethyl)-	AN57
230	Phosphorin, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-4-phenyl-	AN60

Sample	231	232	233	234	235	236	237	238	239	240
SUO	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
KUNTA	0.00	0.20	0.32	0.00	0.00	0.00	0.30	0.00	0.00	0.30
KUORI	2.30	0.00	0.00	2.70	1.90	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TCFO	0.00	1.70	1.80	0.00	0.00	0.00	1.70	0.90	0.00	3.70
TCFB	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
ECFO	0.83	1.50	0.00	0.00	0.00	0.00	0.80	5.60	2.50	0.00
ECFB	0.00	0.40	0.50	0.00	0.00	0.00	1.80	0.00	0.00	2.10

231	Benzoic acid, triethoxy, ethyl ester	AN61
232	Uncosane, 3-methyl-	AN62
233	Uncosane, methyl-	AN63
234	Uncosanone	AN65
235	Tricosatriene	AN66
236	Naphthopyranone, ethenyl-dodecahydro-pentamethyl-	AN69
237	Tricosane, derivative	AN70
238	Dehydroabietic aldehyde	AN71
239	S-Indacene-1,7-dione, tetrahydro-hexamethyl-	AN72
240	Tricosane derivative	AN73

Sample	241	242	243	244	245	246	247	248	249	250
SUO	0.0	0.0	0.0	3.4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.1	0.0
KUNTA	0.0	0.3	0.0	4.6	0.0	0.0	0.0	0.2	0.8	2.1
KUORI	0.0	0.0	0.0	0.0	0.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
TCFO	0.0	2.2	0.0	5.3	3.4	5.4	0.0	1.6	3.3	6.3
TCFB	0.0	0.0	0.0	5.3	1.0	0.1	0.0	0.1	0.0	0.4
ECFO	1.3	3.4	5.6	0.0	0.0	3.9	2.6	1.4	3.3	5.2
ECFB	0.0	0.0	0.73	6.4	0.0	4.8	0.0	1.6	4.3	8.8

241	Isobenzofuranone, tetrahydro-hydroxy-dimethyl- +	AN75
242	Tetracosane, branched	AN76
243	Dehydroabietic acid, methyl ester	AN77
244	Tetracosane	AN78
245	Pentacosane derivative	AN81
246	Hexacosane derivative	AN82
247	Stilbene +	AN83
248	Eicosane, cyclohexyl-	AN84
249	Hexacosane derivative	AN86
250	Heptacosane, branched	AN87

Sample	251	252	253	254	255	256	257	258	259	260
SUO	3.7	3.7	2.8	8.1	0.0	6.8	0.0	0.0	0.0	0.0
KUNTA	5.9	4.6	48.7	129.9	16.8	37.8	0.0	6.8	0.0	9.7
KUORI	3.5	1.8	58.1	815.9	6.8	987.3	62.3	779.0	130.5	1409.2
TCFO	4.0	3.1	68.4	377.7	0.0	115.9	43.1	65.1	0.0	92.8
TCFB	4.5	3.5	69.7	553.1	0.0	67.1	21.7	99.6	0.0	45.9
ECFO	5.6	4.5	34.1	229.9	9.9	186.3	22.5	59.3	42.1	23.1
ECFB	5.2	4.3	0.0	69.5	0.0	21.7	8.3	14.8	0.0	49.0

251	Heptacosane	AN88
252	Octacosane	AN89
253	Methanoic acid	AC1
254	Ethanoic acid	AC2
255	Benzenamine, N-ethyl-	AC3
256	Propanoic acid	AC4
257	Butanoic acid	AC5
258	2-Methyl propanoic acid	AC6
259	2-Methyl butanoic acid	AC7
260	Pentanoic acid	AC8

Sample	261	262	263	264	265	266	267	268	269	270
SUO	7.4	7.3	6.0	3.9	0.0	0.0	17.2	0.0	0.0	0.0
KUNTA	23.9	17.0	8.2	7.3	0.0	0.0	21.2	0.0	161.8	0.0
KUORI	831.6	65.4	59.9	144.2	0.0	68.6	205.7	0.0	343.8	0.0
TCFO	967.7	0.0	0.0	381.5	0.0	0.0	0.0	510.9	77.3	0.0
TCFB	189.3	7.1	8.6	12.4	0.0	0.0	0.0	18.0	12.3	0.0
ECFO	25.9	23.8	8.6	14.0	8.1	11.7	46.9	0.0	43.2	7.0
ECFB	443.6	13.7	32.9	27.4	0.0	0.0	0.0	49.1	46.6	0.0

261	Hexanoic acid	AC10
262	Heptanoic acid	AC12
263	Dimethyl hexanoic acid	AC13
264	Heptanoic acid	AC14
265	Octanoic acid, branched	AC15
266	Phenol, 2-ethyl-	AC16
267	Octanoic acid, branched	AC17
268	Octanoic acid	AC18
269	Benzoic acid	AC19
270	Methanoic acid, cyclohexyl-	AC20

Sample	271	272	273	274	275	276	277	278	279	280
SUO	0.0	0.0	0.0	15.2	0.0	0.0	0.0	0.0	7.6	0.0
KUNTA	0.0	0.0	0.0	30.0	37.8	0.0	0.0	0.0	12.7	0.0
KUORI	63.7	0.0	29.1	345.3	40.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
TCFO	0.0	52.3	0.0	1816.	52.0	21.2	90.8	0.0	1253.	0.0
TCFB	0.0	0.0	0.0	42.3	0.0	0.0	0.0	0.0	10.9	0.0
ECFO	13.0	0.0	40.5	57.2	0.0	0.0	0.0	33.6	26.6	47.8
ECFB	0.0	0.0	0.0	90.8	0.0	0.0	0.0	0.0	21.2	0.0

271	Phenyl acetic acid	AC21
272	Octenoic acid, branched	AC22
273	Nonanoic acid, branched	AC23
274	Nonanoic acid	AC24
275	Benzenemethanamine, N-phenyl-	AC25
276	Undecanoic acid	AC26
277	Decanoic acid, branched	AC27
278	Chlorophenol derivative	AC29
279	Decanoic acid	AC30
280	Undecenoic acid	AC31

Sample	281	282	283	284	285	286	287	288	289	290
SUO	0.0	0.0	0.0	0.0	7.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
KUNTA	0.0	0.0	0.0	0.0	14.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
KUORI	0.0	0.0	0.0	0.0	71.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
TCFO	84.9	0.0	0.0	0.0	122.7	91.8	0.0	9.0	0.0	0.0
TCFB	0.0	0.0	0.0	0.0	87.5	0.0	0.0	0.0	62.9	0.0
ECFO	0.0	15.3	75.0	33.3	11.2	0.0	53.7	55.9	0.0	9.6
ECFB	0.0	0.0	0.0	0.0	18.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

281	Undecanoic acid	AC32
282	Dichloroguaiacol	AC33
283	Dodecenoic acid	AC34
284	Dodecadienoic acid	AC35
285	Dodecanoic acid	AC36
286	Tridecanoic acid	AC37
287	Tridecenoic acid	AC38
288	Tetradecadienoic acid	AC39
289	C34H70 alkane	AC40
290	Tetradecadienoic acid	AC41

Sample	291	292	293	294	295	296	297	298	299	300
SUO	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.1	0.0
KUNTA	0.0	0.0	4.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
KUORI	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	10.9	0.0
TCFO	10.6	0.0	0.0	12.5	0.0	62.8	0.0	68.0	0.0	19.4
TCFB	0.0	0.0	0.0	0.0	6.5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ECFO	0.0	12.9	0.0	0.0	0.0	0.0	27.5	0.0	10.1	0.0
ECFB	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

291	Tetradecenoic acid	AC42
292	Pimaric aldehyde	AC43
293	C34H68 alkene	AC44
294	Tetradecenoic acid, branched	AC45
295	Hydrocarbon, alkane, branched	AC47
296	Pentadecadienoic acid	AC48
297	Pentadecanoic acid, branched	AC49
298	Pentadecenoic acid	AC50
299	Pentadecanoic acid	AC51
300	Pentadecanoic acid	AC52

Sample	301	302	303	304	305	306	307	308	309	310
SUO	0.0	0.0	0.0	0.0	41.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
KUNTA	0.0	0.0	3.7	3.7	66.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
KUORI	0.0	0.0	0.0	0.0	169.6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
TCFO	0.0	107.9	0.0	24.3	147.9	104.7	0.0	0.0	0.0	0.0
TCFB	50.6	0.0	0.0	4.8	59.1	0.0	58.4	0.0	0.0	0.0
ECFO	0.0	0.0	161.6	0.0	184.1	6.2	0.0	7.9	3.9	19.1
ECFB	0.0	0.0	0.0	0.0	87.5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

301	Hydrocarbon, alkane	AC53
302	Hexadecadienoic acid	AC54
303	Hexadecenoic acid	AC55
304	Hexadecenoic acid, branched	AC56
305	Hexadecanoic acid = palmitic acid	AC57
306	Heptadecanoic acid	AC58
307	Hydrocarbon, alkane, branched	AC59
308	Heptadecanoic acid	AC60
309	Heptadecenoic acid	AC61
310	Heptadecenoic acid	AC62

Sample	311	312	313	314	315	316	317	318	319	320
SUO	24.0	0.0	2.0	2.0	0.0	23.3	0.0	0.0	0.0	0.0
KUNTA	55.8	0.0	25.8	38.6	0.0	30.6	0.0	0.0	0.0	0.0
KUORI	24.2	0.0	4.3	17.4	0.0	45.5	0.0	0.0	0.0	0.0
TCFO	18.6	0.0	964.2	0.0	102.5	39.9	0.0	0.0	14.5	0.0
TCFB	13.8	58.2	6.8	13.6	0.0	17.1	0.0	0.0	64.8	0.0
ECFO	8.8	0.0	5.9	17.8	0.0	92.1	18.6	33.6	414.2	232.5
ECFB	6.5	0.0	0.0	0.0	0.0	31.0	0.0	0.0	0.0	0.0

311	P, phthalate	AC63
312	Hydrocarbon, alkane, branched	AC64
313	Linoleic acid	AC65
314	Oleic acid	AC66
315	Linolenic acid johdos	AC67
316	Stearic acid	AC68
317	Resin acid	AC69
318	Fatty acid, unsaturated	AC70
319	Pimaric acid	AC71
320	Isopimaric acid	AC72

Sample	321	322	323
SUO	0.0	0.0	0.0
KUNTA	0.0	0.0	0.0
KUORI	0.0	20.1	0.0
TCFO	0.0	0.0	0.0
TCFB	0.0	57.7	0.0
ECFO	112.6	398.9	47.5
ECFB	0.0	0.0	0.0

321	Palustric acid	AC73
322	Abietic acid	AC75
323	Chlorodehydroabietic acid	AC76

Kuvailulehti

Julkaisija	Suomen ympäristökeskus	Julkaisu-aika	1998
Tekijä(t)	Jaakko Paasivirta ja Pirjo Mikkelsen Jyväskylän yliopisto, kemian laitos		
Julkaisun nimi	Happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia Vaihe II. Orgaanisten yhdisteiden kemiallinen karakterisointi ja korrelaatiot		
Julkaisun osat/ja muut saman projektin tuottamat julkaisut	Projektin vaiheesta I on ilmestynyt seuraavat julkaisut: Vesi- ja ympäristöhallinnon julkaisusarja A nro 189, Suomen ympäristökeskuksen monisteen nro 3, nro 4 ja nro 20 sekä The Finnish Environment sarjan julkaisu nro 17. Projektin vaiheesta II tulee ilmestymään neljä julkaisua.		
Tiivistelmä	Projektin I vaiheen tulosten ja sen jälkeen tehdyn kirjallisuustutkimuksen perusteella pidettiin tarpeellisenä jatkaa projektia vaiheella II. Se sisälsi ECF- ja TCF-mäntymassan pilot-puhdistettujen jätevesien malliekosysteemitutkimuksia, kemiallista karakterisointia sekä jätevesien akuutteja screenaustestejä. Vertailukohteina tutkittiin myös yhdyskuntajätevettä ja suovettä. Kemiallisella karakterisoinnilla pyrittiin saamaan aikaisempaa tarkempi kuva jätevesivaikutuksia aiheuttavista komponenteista. ECF- ja TCF-näytteistä tunnistettiin ja kvantitoitiin 324 yhdistettä. Useimmille saatiin tarkka rakenne, muille rakennetyyppi. Vertailunäytteistä kvantitoitiin vain ne yhdisteet, jotka olivat samoja kuin ECF- ja TCF-vesistä tunnistetut. Akuutit myrkyvaikutukset sekä krooninen kalatoksisuus ja sedimentin biomassan kasvu pyrittiin selittämään yhdisteryhmien ja yhdisteiden pitoisuuksien vaihtelulla. Alustavana tilastokäsittelynä tulostettiin kaksisuuntaiset Pearson-korrelaatiot. Jätevesien kemian ja ekologisten vaikutusten välillä todettiin tiettyjä korrelaatioita. Tulosten perusteella voidaan valita vaikutusten kannalta mielenkiintoisimmat yhdisteet malliaineiksi, joilla voidaan tehdä jatkotutkimuksia.		
Asiasanat	selluteollisuus, valkaisu, jätevesi, kemiallinen karakterisointi		
Julkaisusarjan nimi ja numero	Suomen ympäristökeskuksen moniste nro III		
Julkaisun teema	ympäristönsuojelu		
Projekti-hankkeen nimi ja projektin numero	Happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia, Vaihe II, nro xcl01		
Rahoittaja/toimeksiantaja	Enso Oy, Finnish Peroxides Oy, Kemira Chemicals Oy, Oy Metsä-Botnia Ab, UPM-Kymmene Oy, Suomen ympäristökeskus, Ympäristöministeriö		
Projektiryhmään kuuluvat organisaatiot	Enso Oy, Finnish Peroxides Oy, Kemira Chemicals Oy, Oy Metsä-Botnia Ab, UPM-Kymmene Oy, Suomen ympäristökeskus, Suomen ympäristötutkijaryhmä, Jyväskylän yliopisto, Keskuslaboratorio, LoSYK, LSYK,		
	ISSN 1455-0792	ISBN 952-II-0244-6	
	Sivuja 54	Kieli	suomi ; sisältäen englanninkielisen yhteenvedon
	Luottamuksellisuus Julkinen	Hinta	-
Julkaisun myynti/jakaja	Suomen ympäristökeskus, asiakaspalvelu , puh. 09-40300100, fax 09-40300190 PL 140 00251 Helsinki		
Julkaisun kustantaja	Suomen ympäristökeskus		
Painopaikka ja -aika	Helsinki 1998		
Muut tiedot			

ISBN 952-11-0244-6
ISSN 1455-0792